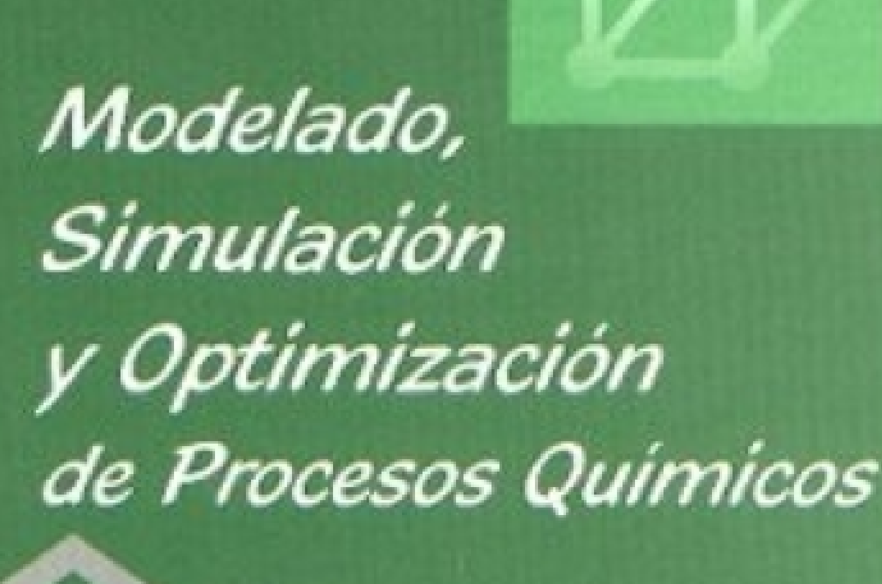
Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos







MODELADO, SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

Autor-Editor:

Dr. Nicolás José SCENNA

AUTORES

Dr. Pío Antonio Aguirre

Dra. Sonia Judith Benz

Dr. Omar Juan Chiotti

Dr. H. José Espinosa

Ing. Marta Beatriz Ferrero

Dr. Jorge Marcelo Montagna

Ing. Miguel C. Mussati

Ing. Gustavo Alberto Pérez

Ing. Jorge Rodríguez

Dr. Héctor Enrique Salomone

Dr. Alejandro S. M. Santa Cruz

Dr. Enrique Eduardo Tarifa

Dr. Jorge Vega

A la memoria de mi padre.

A mi esposa Adriana, un agradecimiento
por su permanente apoyo.

A mis maestros, colegas y alumnos.

AGRADECIMIENTOS:

- *A la Universidad Tecnológica Nacional y a la Facultad Regional Rosario, que apoyaron a través de sus autoridades, con su permanente aliento, la concreción de esta obra.*

- *A los demás autores, que colaboraron desinteresadamente y con gran entusiasmo.*

- *A Silvina Antille, Beatriz Gómez y Carlos Ruiz, todos ellos de INGAR, sin cuya colaboración en el mecanografiado y la confección de los gráficos esta obra no hubiese podido concretarse. Un infinito agradecimiento por su colaboración y paciencia.*

- *A los becarios y demás integrantes del GIAIQ, Dto. de Ing. Qca. de la UTN-FRR, por su colaboración y comentarios, y en especial a Miguel Muñoz, Gastón Cassaro y Verónica Ponzetti.*

- *A Alejandro Santa Cruz y Sonia Benz, por su gran ayuda en el ordenamiento final de texto, ecuaciones y figuras, además de la supervisión del contenido.*

SOBRE LOS AUTORES

Dr. Pío Antonio Aguirre

Ingeniero Químico de la Facultad de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional de Litoral-Santa Fe.
Investigador Adjunto de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad de Ing. Química, Universidad Nacional del Litoral.

Dra. Sonia Judith Benz

Ingeniera Química de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctora en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Profesor Adjunto, en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Omar Juan Chiotti

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Villa María , Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química en la Universidad Nacional de Litoral-Santa Fe.
Investigador Asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. H. José Espinosa

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.

Ing. Marta Beatriz Ferrero

Ingeniera Química de la Facultad Regional Villa María, Universidad Tecnológica Nacional.
Jefe Trabajos Prácticos de la Cátedra Investigación Operativa II de la Carrera en Sistema de Información-Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Jorge Marcelo Montagna

Licenciado en Matemática Aplicada de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.
Doctor en Tecnología Química de la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador Adjunto del CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.
Profesor Titular en ICES-Sunchales.

Ing. Miguel Mussati

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Villa María , Universidad Tecnológica Nacional.
Becario de Perfeccionamiento de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.

Ing. Gustavo Alberto Pérez

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.
Investigador Independiente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Titular en la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral.

Ing. Jorge Rodríguez

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Profesor Titular en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Héctor Enrique Salomone

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral
Doctor en Ingeniería Química en la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe
Investigador Asistente de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Alejandro Santiago M. Santa Cruz

Licenciado en Física de la Facultad de Ciencias Exactas e Ingeniería, Universidad Nacional de Rosario
Doctor en Tecnología Química en la Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Nicolás José Scenna

Ingeniero Químico de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe.
Investigador Adjunto de CONICET en INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño.
Profesor Titular de la Facultad Regional Rosario, Universidad Tecnológica Nacional.

Dr. Enrique Eduardo Tarifa

Ingeniero Químico de la Facultad de Ingeniería ,Universidad Nacional de Jujuy (UNju).
Doctor en Ingeniería Química de la Universidad Nacional del Litoral - Santa Fe.
Profesor Adjunto en la Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Jujuy
Investigador de CONICET en la Universidad Nacional de Jujuy (UNJu).

Dr. Jorge Vega

Ingeniero Electricista, Universidad Nacional de la Plata.
Doctor en Tecnología Química, Universidad Nacional del Litoral-Santa Fe.
Investigador Asistente de CONICET en INTEC, Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química
Profesor Adjunto en la Facultad Regional Santa Fe, Universidad Tecnológica Nacional.

PROLOGO

El propósito de esta obra es brindar una introducción al modelado, simulación y optimización de procesos químicos. Esta idea, que ha madurado desde hace tiempo, se cataliza por la necesidad de disponer de bibliografía básica actualizada con relación al nuevo programa de la carrera de ingeniería química implementado recientemente en la Universidad Tecnológica Nacional.

El contenido y configuración del libro se han diagramado poniendo énfasis en la simulación de procesos químicos tanto estacionarios como dinámicos, al mismo tiempo que se introduce al lector en áreas fundamentales para afrontar la tarea del diseño y modelado integral de procesos químicos. Por otra parte, además de los modelos de equipos más convencionales o clásicos se incorporan ejemplos específicos en varios campos, enfoque que no es habitual en este tipo de obras, tratando en nuestro caso de advertir al lector acerca de la necesidad de comprender los fundamentos del modelado de procesos, ya que probablemente, y pese a la cantidad de simuladores comerciales de propósitos generales existentes o por desarrollarse, en su carrera profesional deberá enfrentarse a la tarea de implementar “su” propio prototipo de modelo, aunque más no sea de equipos muy particulares del proceso a analizar.

Al realizar una obra de este tipo desde el comienzo se tropieza con un problema transcendente. Qué áreas enfatizar durante su desarrollo?. Es sabido que en la disciplina de simulación convergen diversas corrientes del saber, como el análisis de los métodos numéricos para la solución de ecuaciones tanto algebraicas como diferenciales, el modelado de procesos, operaciones unitarias y fenómenos de transporte, estimación de propiedades fisicoquímicas, etc.

Además de los fundamentos, resulta claro que el área informática está íntimamente relacionada con la implementación de los programas específicos de simulación, y en particular, con los grandes sistemas de simulación de procesos químicos en general.

El campo de los sistemas de información aplicados a la ingeniería de procesos ha crecido enormemente en esta última década. Actualmente, el problema principal radica en la compatibilidad de todas las herramientas generadas (para las más diversas aplicaciones y en los entornos más disímiles), para crear un sistema versátil, eficiente, y capaz de integrar tanto las herramientas de diseño y simulación como las de finanzas, mantenimiento, control, supervisión del proceso, bases de datos de clientes, stocks, etc. Sin duda, esta es una tarea muy compleja que si bien evolucionará lentamente, proveerá en un futuro cercano una herramienta informática muy

poderosa para el manejo de procesos tanto en la etapa de diseño como en la de operación (tiempo real).

Dentro de este contexto, cada ítem mencionado más arriba puede por sí solo justificar un volumen independiente. El objetivo y aspiración principal es plantear una síntesis adecuada que logre introducir al alumno de grado a toda la temática expuesta, pero enfatizando en el tema central del libro, cual es el modelado y simulación de procesos químicos.

Esta obra está fundamentalmente dedicada a la carrera de grado, aunque se encuentra en el volumen suficiente material de interés para un curso de posgrado, al menos en los aspectos introductorios de varios tópicos esenciales dentro del contexto del modelado y la simulación de procesos químicos.

En función de lo expuesto, se pretende lograr con esta contribución, una obra que abarque aspectos aunque sea un nivel introductorio de temas muy importantes en el área de la simulación en ingeniería química; no suficientemente abordados al presente por otros textos, por ejemplo procesos biológicos específicos y el tratamiento de procesos batch, ya que la industria farmacológica, de alimentos, químicos en general, y otras muchas, tendrán próximamente un protagonismo importante en nuestra región.

Abarcar la temática de simulación de procesos en un libro de carácter general como el presente, sin antes reflexionar claramente acerca del origen del diagrama a analizar, es decir el porqué de la estructura a simular de tal forma de lograr la transformación deseada partiendo de las materias primas para llegar a los productos, es conceptualmente cuestionable. En efecto, si bien todavía hoy debemos considerar a la tarea de generar un flowsheet general a partir de la idea básica más un arte que una metodología sistemática (y por lo tanto implementable en un algoritmo computacional), no puede evitarse una introducción a la síntesis de procesos, a los efectos de familiarizar al lector con metodologías que permiten generar diagramas o estructuras para lograr un proceso óptimo. Al respecto, conviene resaltar que en general el alumno se forma en nuestros ámbitos universitarios considerando al diagrama de flujos del proceso como una suerte de estructura "que nos viene dada" y que se debe adoptar como tal. En este libro, se resalta a la etapa de simulación como una más dentro del ciclo de actividades secuenciales para el diseño del proceso, y no como *la herramienta* para el diseño.

Desde el punto de vista de las tendencias, se puede vislumbrar -a juzgar por los trabajos publicados recientemente- que el futuro de la simulación (o al menos las grandes avenidas del

desarrollo en la próxima década) pasa por la simulación dinámica, y en segundo término, por la simulación cualitativa, es decir, simulación de tendencias y propagaciones de perturbaciones en el proceso. De ambos campos se deriva una gran actividad para el ingeniero de procesos dedicado al control, a la supervisión de procesos, a la diagnosis de fallas, a la optimización en tiempo real, etc. Paralelamente, la flexibilidad de los futuros simuladores permitirá muy fácilmente al usuario incorporar sus propios modelos. Siempre existirá la necesidad de los mismos. Basta mencionar que en cada proceso se dispondrá muy probablemente de un equipo específico (por ejemplo el reactor) cuyas características serán siempre particulares, y por lo tanto no disponible como un programa "encapsulado o enlatado" en un simulador comercial.

Además, en simulación dinámica, para lograr resultados muy aproximados a la realidad (por ejemplo al simular políticas de arranque o parada, modos de falla del equipo, etc), se deberán utilizar modelos en los cuales muchas características de diseño del equipo sean contempladas. Estos modelos pueden o no estar disponibles en un simulador de uso general. Por lo tanto, nuevamente llegamos a la conclusión que frecuentemente será necesario modelar nuestros propios equipos e incorporarlos al simulador. Luego, será indispensable conocer conceptualmente cómo hacerlo, y con qué herramientas debemos enfrentar la tarea. En este punto, es importante lograr que el alumno extraiga conclusiones acerca de la siguiente reflexión: *No es lo mismo ser un excelente operador de un simulador comercial (conocer todas las opciones disponibles, cómo imprimir resultados, cómo ingresar en forma rápida los datos, etc.) que conocer cómo programar módulos para el mismo, qué métodos fisicoquímicos utilizar para cada problema, cuándo se podrían esperar múltiples estados estacionarios en la simulación de torres de destilación, etc.*; y para esto, resulta indispensable una adecuada formación teórica, que es uno de los objetivos de esta obra.

ESTRUCTURA Y CONTENIDO

Estructuralmente, el presente volumen está compuesto por veintiún capítulos, cada uno de ellos diagramado en forma independiente, con una individualidad temática para que cada tema pueda ser consultado específicamente. Sin embargo, están ordenados secuencialmente de tal manera de facilitar a quien lo desee una introducción autodidáctica al *modelado, optimización y simulación* de procesos químicos.

Para un curso específico de simulación de procesos los dos primeros capítulos podrían ser obviados, comenzando directamente con la introducción a los métodos numéricos para resolver sistemas de ecuaciones no lineales. También puede considerarse o no la simulación dinámica y en tiempo real (Capítulos XIII al XVIII, y XXI), o la incorporación o no de elementos de optimización en estado estacionario (Capítulos XI y XII). *Por último, para lograr una breve introducción conceptual al problema global del modelado de procesos químicos, es recomendable cubrir todos los capítulos.*

Dentro de este contexto, el Capítulo I contiene una breve introducción a las diversas herramientas y métodos para el modelado de procesos; mientras que en el Capítulo II se brinda una somera introducción a la síntesis de procesos químicos. Se plantean los conceptos asociados a la generación de un flowsheet o diagrama de flujos. Para ello se introduce el concepto de optimización, tanto teniendo en cuenta variables operacionales como estructurales. Seguidamente, una vez logrado (o propuesto) el diagrama de flujos, se introducen los objetivos que persigue la tarea de simulación del proceso. Por otra parte, se muestra la importancia de la simulación estacionaria o dinámica en las distintas etapas de la concreción de un proyecto de planta química, a los efectos de fijar ideas acerca del uso común de las herramientas informáticas, y en especial los diversos tipos de simuladores, en la tarea del ingeniero químico.

En el Capítulo III se desarrolla una introducción a los métodos numéricos para la solución de sistemas de ecuaciones algebraicas, enfatizando los sistemas no lineales, y los métodos más comunes utilizados en la solución de modelos en ingeniería química.

En el Capítulo IV se discuten los aspectos específicos para la solución de sistemas de ecuaciones no lineales de elevada dimensión y poco densos (matriz de coeficientes rala). También se desarrollan someramente los conceptos de particionado, rasgado y ordenamiento, a los efectos de introducir al lector a los métodos y técnicas iterativas utilizadas en los simuladores, ya sea globales o modulares secuenciales.

En el Capítulo V se presenta una introducción al concepto de simulación de procesos,

haciendo hincapié en los procesos químicos. Se plantean los aspectos y definiciones conceptuales, como así también una clasificación de los simuladores, destacando las diversas filosofías o arquitecturas para el diseño de los mismos.

En el Capítulo VI se presentan algunas ideas acerca de los componentes básicos de un simulador de procesos químicos, enfatizando los simuladores modulares secuenciales. También se destacan los aspectos del modelado de los equipos que representan las distintas operaciones unitarias, tomando un ejemplo sencillo que facilita la comprensión conceptual.

En los Capítulos VII y VIII se introduce brevemente el problema de la estimación de propiedades fisicoquímicas. Se destaca la importancia de lograr un criterio para seleccionar el método adecuado de estimación para lograr resultados apropiados. Se hace hincapié en los principales métodos para la estimación de la constante de equilibrio y entalpías en mezclas multicomponentes.

En el Capítulo IX se desarrolla el modelo de simulación para un equipo de separación por evaporación flash. Se analizan diversas opciones de operación, tales como sistemas adiabáticos, isotérmicos, equilibrio líquido-vapor, líquido-líquido y líquido-líquido-vapor. Se destaca además, la íntima relación que existe entre el modelado de este equipo y los cálculos de temperatura de burbuja y rocío, y por último, la determinación de las fases presentes dadas las composiciones, la temperatura y la presión asociadas a una mezcla.

En el Capítulo X se analizarán algunos de los métodos que se han propuesto para la simulación en estado estacionario de equipos de separación multicomponente en múltiples etapas, en contracorriente. Se enfatizan los métodos semi-rigurosos y rigurosos, por ser los más utilizados y convenientes para la mayoría de los casos prácticos. Se discuten algunas características de los problemas de separación de mezclas no ideales, por ejemplo la posibilidad de obtener múltiples soluciones.

En el Capítulo XI se introducen los principios elementales para la optimización de funciones, de una variable y multivariable, sin o con restricciones, ya sean éstas de igualdad o desigualdad, lineales o no lineales. Se destaca además la necesidad de plantear el problema de diseño desde un punto de vista de la optimización, y su relación con la simulación estacionaria de procesos.

En el Capítulo XII se explica brevemente la aplicación de métodos numéricos para incorporar al modelo de simulación estacionaria (ya sea modular secuencial o global) una función objetivo a optimizar, especificando determinadas variables de optimización. Se enfatizan los simuladores modulares secuenciales.

En el Capítulo XIII se realiza una introducción a los métodos numéricos clásicos

disponibles para resolver sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias, enfatizando además el problema de los sistemas stiff.

En el Capítulo XIV se describe el modelado de equipos sencillos y se comentan brevemente los aspectos relacionados a la construcción de simuladores dinámicos. Se analiza también el módulo para la simulación de un equipo flash, ya tratado desde el punto de vista estacionario en el Capítulo IX.

En el Capítulo XV se desarrollan modelos dinámicos para operaciones unitarias típicas de separación de mezclas multicomponentes, por ejemplo una torre de destilación, con el objeto de compararlos con los métodos similares para simulación estacionaria discutidos en el capítulo X. Se discuten algunas aplicaciones del modelo.

En el Capítulo XVI se analizan someramente algunas aplicaciones de la simulación dinámica al control de procesos, destacándose nociones elementales acerca de la simulación de sistemas a lazo abierto o cerrado, sistemas simples de control, etc.

En el Capítulo XVII se analizan módulos de simulación dinámica para sistemas específicos. Aquí se destaca la importancia de adquirir habilidad para modelar diversos problemas, debido a la imposibilidad de lograr, a través de un simulador de propósito general, la cobertura de todos los casos. Se trata de demostrar, a través de los ejemplos, que ya sea por el tipo de operación o simular, o bien, por la rigurosidad y el grado de detalle necesarios, existirá siempre la potencial necesidad de desarrollar modelos propios.

En el Capítulo XVIII se analiza otro caso específico, en el cual resulta evidente la necesidad planteada en el capítulo anterior. En efecto el problema de lograr un simulador apropiado para los reactores biológicos en general está lejos (al igual que cualquier reactor) de poder ser generalizado en forma sencilla y eficaz.

En el Capítulo XIX se explica brevemente la simulación de procesos batch y la problemática asociada para tratar plantas multiproducto y multipropósito, las cuales poseen características bien distintas a los procesos continuos. Por último, se plantea el problema de la simulación de procesos semicontinuos y se introduce al lector en el campo de la simulación discreta.

En el Capítulo XX se discuten algunos aspectos asociados a la medición y estimación de parámetros en un proceso, el problema del ruido en las mediciones y su tratamiento, así como también el problema de la reconciliación de datos en plantas de proceso.

Por último, en el Capítulo XXI se introduce al concepto de simulación dinámica en tiempo real. Se comentan los aspectos específicos a tener en cuenta para diseñar estos simuladores, y se ejemplifican por medio de la construcción de un prototipo para un proceso

simple de pasteurización de leche.

ÍNDICE TEMÁTICO

CAPITULO VI: " INTRODUCCIÓN A LAS CARACTERÍSTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL"

CAPITULO VII: " PROPIEDADES TERMODINÁMICA DE EQUILIBRIO"

CAPÍTULO I

INTRODUCCIÓN A LOS MÉTODOS INFORMÁTICOS APLICADOS AL MODELADO EN INGENIERÍA

Por
Nicolás José Scenna

I.1 INTRODUCCIÓN

Es sabido que el procedimiento metodológico fundamental para resolver un problema en ingeniería consiste en representarlo de una manera adecuada, de tal forma de lograr una sustitución del sistema real (equipo, proceso, etc.) por uno más adecuado para el tratamiento formal. Por lo general, las herramientas lógico-matemáticas nos brindan un marco útil para representar mediante un sistema de símbolos y reglas, el comportamiento de los sistemas reales.

Bajo el método científico, por ejemplo, se consolidan leyes y teorías en diversas ramas del conocimiento, las cuales son expresables por medio de sistemas de ecuaciones diferenciales. En otras palabras, se logra construir un nuevo sistema, del cual conocemos sus *reglas de juego* y símbolos, como un resultado de un proceso de abstracción de la realidad. Obviamente, dado la infinita complejidad de los fenómenos fisicoquímicos, estas construcciones abstractas, conocidas genéricamente como modelos, son sólo meras aproximaciones de la realidad. En efecto, no es otra cosa lo que se realiza cuando en física utilizamos ecuaciones para describir el movimiento de una partícula, o resolvemos los balances correspondientes aplicando las leyes de conservación de la materia, energía o cantidad de movimiento; o bien cuando nos enfrentamos al diseño de un equipo según los procedimientos que conocemos a partir del campo de las *operaciones unitarias*.

De aquí se desprende que si bien el sistema real a estudiar es único, puede existir un número muy grande de modelos asociados al mismo. En efecto, para obtener un modelo que pueda resolverse (es decir que sea útil), resulta necesario adoptar un conjunto de hipótesis. Por ejemplo, si consideramos la fricción, si es importante o no contemplar el intercambio de energía por radiación, si existen y se consideran los efectos electromagnéticos, etc. Las necesidades de exactitud que el problema a resolver nos impone, determinan el conjunto de hipótesis a utilizar. Por ejemplo, el error de una milésima de grado en el cálculo de un ángulo puede no tener implicancias en el punto de impacto de un proyectil que recorre una distancia pequeña, pero no puede afirmarse lo mismo para una trayectoria intergaláctica. En

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

síntesis, dado el sistema real y los objetivos tecnológicos perseguidos, existirá un conjunto de hipótesis adecuadas que determinarán las características del modelo, o sistema de ecuaciones a resolver. Lo expresado recientemente implica una relación entre modelo (conjunto de hipótesis asumidas) y objetivos del ingeniero.

Resulta evidente que no todo sistema de ecuaciones puede resolverse fácilmente, al menos desde el punto de vista analítico. Esto impuso a lo largo de la historia limitaciones importantes al tipo de modelos que podían resolverse, o de otra forma, la necesidad de recurrir a hipótesis inadecuadas o restrictivas (super-simplificaciones) para al menos poder tratar el problema. Es por ello también que en los orígenes de las ciencias tecnológicas los modelos podían ser considerados en gran medida como empíricos, esto es, con parámetros incorporados que surgían de experiencias, y no a partir de los primeros principios o leyes fundamentales. No debe extrañar que aún hoy, pese a todos nuestros avances, exista la necesidad de utilizar permanentemente parámetros en nuestros modelos, que no son otra cosa que la medida de nuestra ignorancia, y por lo tanto, implican la necesidad de reemplazar las leyes básicas por aproximaciones causales obtenidas de datos experimentales. Este es el caso por ejemplo de la estimación de las propiedades de equilibrio de mezclas de comportamiento altamente no ideal.

A medida que evolucionaron las diversas ramas de las matemáticas y con el advenimiento de la ciencia de la computación, poderosa herramienta complementaria al análisis numérico y simbólico, se abrieron caminos revolucionarios. Contar con herramientas más potentes para resolver sistemas de ecuaciones, o lo que es lo mismo, relativizar la necesidad de adoptar hipótesis inadecuadas al plantear modelos para resolver problemas complejos, resultó un gran paso adelante. Más aún, la velocidad de cálculo provocó que la dimensión abordable se incrementara rápidamente. En efecto, si bien el grado de complejidad conceptual para resolver la inversa de una matriz de dimensión tres es equivalente al de una de cinco mil, resulta obvio que la complejidad operativa o fáctica no resulta comparable. La computación ha barrido literalmente con dicha limitación, haciendo ahora tratables problemas cuya dimensión es tal, que décadas atrás ni siquiera era pensable plantearlos.

Dentro de este contexto, el propósito de los siguientes capítulos es mostrar cómo implementar modelos para resolver problemas comunes en el campo de la ingeniería química, cómo resolverlos desde el punto de vista computacional, y otro punto importante, qué tipos de problemas (modelos) surgen al cubrir distintos aspectos de la ingeniería. En este punto resulta necesario comentar que los problemas de diseño, optimización, simulación dinámica o estacionaria, supervisión o diagnosis de fallas en tiempo real, etc., tienen cada uno particularidades específicas, lo cual a su vez implica la conveniencia de utilizar modelos apropiados para cada caso.

En este capítulo se tratará de mostrar someramente las diferencias y características conceptuales de diversos tipos de modelos, surgiendo los mismos a partir de la naturaleza específica de los problemas a resolver. En efecto, por ejemplo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

no resulta equivalente analizar el funcionamiento de una planta química dada (conocemos su estructura) que diseñar el proceso contando sólo con los datos de las materias primas disponibles y los productos deseados. Al igual que en arquitectura, cuando nos enfrentamos al diseño de una estructura para un fin determinado, existirán por lo general, como se verá en el Capítulo II, un número muy grande de alternativas para analizar. Por lo tanto, aquí el modelo deberá contener variables estructurales, además de las habituales. Ello implica un problema difícilmente traducible a ecuaciones matemáticas. En función de nuestro estado de conocimiento actual, el diseño de un proceso sigue siendo más un arte que ciencia, o lo que es equivalente, depende en una gran parte del juicio creativo del diseñador, además de la aplicación de reglas formales del análisis lógico-matemático. Por lo tanto, deberá *encapsularse* dicho conocimiento en el pretendido modelo.

A continuación se brindará un breve análisis de la evolución histórica del área, a los efectos de situar al alumno desde esa perspectiva.

I.2 EVOLUCIÓN HISTÓRICA

La ciencia nos provee indicios acerca de la existencia, hace más de doce millones de años, de un *cuadrumano*, ancestro, según teorías arqueológicas, del actual mono chimpancé y del hombre. Más aún, en la cadena evolutiva, el actual *homo sapiens-sapiens* se supone aparece hace *solo* ciento cincuenta (evidencia arqueológica) o doscientos mil años (evidencia genética); comenzando hace aproximadamente cinco mil años a dominar los metales, para llegar hace *solo* dos décadas a masificar el uso de la computadora, en plena *era espacial*.

Por otra parte, la incorporación de la *informática* al acervo cultural del hombre nos indica una evolución similar. En efecto, desde el habla (no hay acuerdo acerca de cuándo aparece, ya que algunas teorías nos indican que nuestros ancestros hablaban con el objeto de comunicarse hace ya más de un millón de años), la escritura sistematizada y mecanizada -imprenta- recién se instaló entre nosotros hace aproximadamente cinco siglos; y por último, la computadora, hace apenas medio siglo, siendo masificada (PC's) hace solo dos décadas. Esto indica obviamente, una gran *aceleración del tiempo histórico*.

Ante estos acontecimientos, la pregunta que surge naturalmente es ¿hacia dónde vamos?. Sin embargo, no es el objetivo del presente libro responder esta inquietud. Aquí nuestra inquietud es más limitada. Debemos reflexionar acerca del futuro inmediato de las ciencias de la ingeniería y el perfil de la informática dentro de este contexto. Es evidente que la aceleración de las olas de innovaciones o ciclos de descubrimientos y aplicaciones tecnológicas implica un disparo tanto a nivel de cada rama de la ciencia como en el conjunto de actividades socio-económicas, haciendo difícil *digerir* los nuevos conocimientos y las formas de organización social que éstos involucran.

Se vislumbra, a partir de la historia de las ciencias, la filosofía de las ciencias

y la teoría de sistemas, que todo proceso de aprendizaje, o de generación de tecnologías por más variado que sea (incorporación de nuevas palabras al vocabulario de un niño, el descubrimiento de los elementos químicos que conforman la tabla periódica, la eficiencia de las máquinas térmicas, la eficiencia en el rendimiento de las *lamparitas*, etc.), se desarrolla lentamente al principio, para *dispararse* en un momento dado, y luego, nuevamente, aminorar la evolución en el tiempo, tendiendo lentamente a un valor asintótico (límite de eficiencia). Esta curva es la llamada curva de aprendizaje, logística o sigmoidea (ver Figura (I.1)).

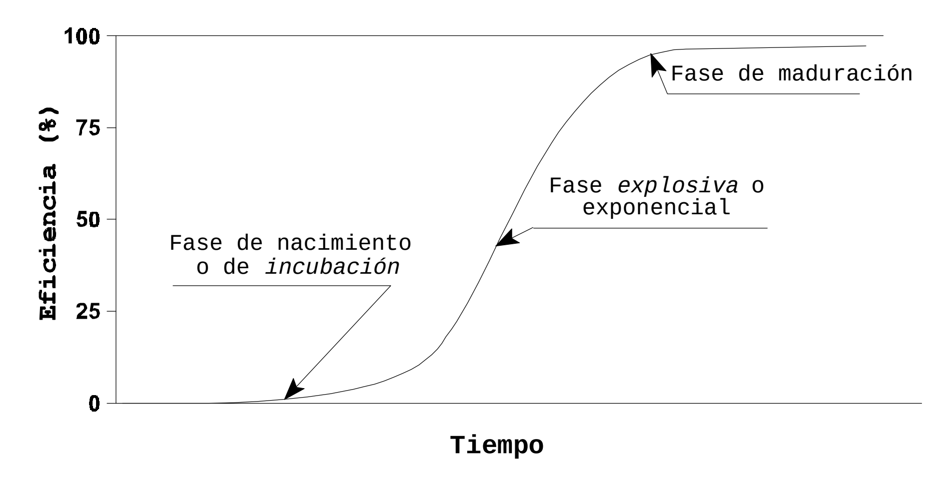


Figura I.1: Curva sigmoidea que representa el proceso de maduración de una tecnología.

Del análisis comparativo de las mismas pueden obtenerse parámetros estimativos de la evolución de las tecnologías, tendencias de las olas de innovaciones básicas y de las aplicaciones tecnológicas, etc. Dentro de este contexto, se estima para el futuro, en base a los datos históricos, una aceleración del ciclo de innovaciones y la frecuencia de los procesos de descubrimientos innovativos y sus aplicaciones tecnológicas.

Mucho se ha recorrido ya desde la aparición de la primera computadora digital (ENIAC). Desde la máquina de Pascal o el ábaco, la regla de cálculo o cualquiera de los instrumentos auxiliares utilizados para resolver los complejos problemas que se presentan en ingeniería, el hombre se ha caracterizado por ganar eficiencia en forma constante. Como vimos, la curva sigmoidea (Figura (I.1)) representa sorprendentemente los tramos característicos de evolución de numerosas aplicaciones tecnológicas provenientes de disciplinas diversas tales como biología, medicina, alimentación, ingeniería aeroespacial, informática, etc. Lo particularmente

destacable es que en el campo de la informática como herramienta para resolver problemas de ingeniería, recién estamos entrando en la fase que puede llamarse de crecimiento *exponencial*. Esto significa que si bien lo recorrido desde la ENIAC hasta aquí parece asombroso, existe una gran probabilidad que lo que nos depara el futuro cercano lo sea aún más.

Varias consecuencias resultan evidentes. La más importante, desde el punto de vista didáctico, es la necesidad de formarnos con una gran capacidad de adaptabilidad, flexibilidad y vocación por el cambio permanente, el razonamiento profundo y la *digestión* de los fundamentos y conceptos transcendentes frente al *aluvión* de información que nos bombardea. Este libro es un intento en esa dirección. Se trata de introducir al lector a los conceptos y estrategias más relevantes del modelado de procesos utilizando métodos informáticos. También se pretende someramente introducir temáticas con cierta probabilidad de desarrollo inminente en un futuro cercano. Por otra parte, se intenta presentar una visión integral del problema de modelado de procesos, aunque se enfatiza con cierto grado de detalle el aspecto de simulación estacionaria y dinámica, frente al campo del diseño y optimización. Esto es así debido a que las herramientas necesarias para estas últimas áreas resultan más complejas, en general propias de cursos de especialización y posgrado.

En síntesis, al tratar el problema del modelado desde un punto de vista integral, debemos discutir conceptualmente los diversos enfoques que se utilizan así como las herramientas matemáticas necesarias para su tratamiento.

I.3. MÉTODOS NUMÉRICOS COMO HERRAMIENTA PARA EL MODELADO DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA

Como veremos en los capítulos siguientes, la simulación digital constituye una poderosa herramienta para la resolución de las ecuaciones que describen a los sistemas en ingeniería química. Las principales dificultades que se plantean son principalmente:

a) Encontrar la solución de un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales (que usualmente se efectúa mediante un método iterativo, según veremos en los Capítulos III y IV).

b) Efectuar la integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias y en derivadas parciales mediante ecuaciones discretizadas en diferencias finitas que aproximan a las soluciones de las ecuaciones diferenciales continuas, según se analizará en el Capítulo XIII.

Los métodos numéricos son una clase de algoritmos para resolver una amplia variedad de problemas matemáticos. Únicamente se emplean operaciones lógicas y aritméticas; por consiguiente, pueden implementarse fácilmente sobre computadoras digitales.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En realidad, los métodos numéricos fueron desarrollados muchos años antes que surgieran las computadoras electrónicas digitales. En efecto, un gran número de los métodos numéricos usualmente utilizados datan de los comienzos de las matemáticas modernas. Sin embargo, el empleo de tales métodos estuvo restringido hasta el advenimiento de las computadoras, incrementándose dramáticamente al llegar a la mayoría de edad con la introducción de las computadoras electrónicas digitales.

La combinación de métodos numéricos y computadoras digitales constituye una poderosa herramienta para el análisis matemático. Por ejemplo, los métodos numéricos son capaces de manejar no linealidades, modelos asociados a geometrías complejas y sistemas de ecuaciones acopladas que son necesarios para el modelado eficiente de muchos sistemas fisicoquímicos que se presentan en ingeniería.

En la práctica, rara vez se consideran enfoques analíticos a los problemas de ingeniería en razón de la complejidad de los sistemas a resolver. Aún en problemas para los que podrían obtenerse con cierto esfuerzo soluciones analíticas, los métodos numéricos son poco costosos, fáciles de emplear y con frecuencia se dispone de ellos en programas comerciales.

La primera pregunta que uno se formula es si existe algún límite a la capacidad de cálculo de los métodos numéricos. La respuesta es afirmativa. Es sabido que si un problema no puede resolverse analíticamente, lo mejor es programarlo en una computadora (mediante un algoritmo adecuado). Este punto de vista se debe, sin lugar a dudas, al enorme poder de cálculo de los métodos numéricos. Sin embargo, también es cierto que existen muchos problemas que son imposibles de resolver utilizando métodos numéricos. Para diversos problemas no se ha encontrado todavía un modelo matemático completo y seguro, de manera que resulta obvio que es imposible encontrarles una solución numérica. La dimensión de otros problemas es tan grande que su solución está más allá de los límites prácticos en términos de la tecnología computacional disponible. Por ejemplo, en problemas fluido-dinámicos que involucran flujos turbulentos, en estimaciones meteorológicas o climáticas (campos de vientos, presiones, temperaturas, etc.), y como veremos más adelante, en diversos problemas que se plantean en el área de la ingeniería química, existen serias limitaciones en el área de diseño y de optimización en tiempo real, etc.

En los últimos años se han desarrollado grandes programas computacionales comerciales para simular el comportamiento de sistemas de ingeniería de todo tipo. Usualmente, estos programas se diseñan para que sean utilizados por aquellos profesionales de la ingeniería sin un conocimiento intensivo de su funcionamiento interno.

Por otra parte, existen bibliotecas (en continua expansión) de subrutinas de cálculo que utilizan sofisticados métodos numéricos para realizar una amplia variedad de tareas matemáticas, cubriendo virtualmente todos los campos del análisis numérico, aplicaciones estadísticas, etc. De cara a estos hechos uno podría

verdaderamente sorprenderse si existiese por parte de los profesionales de la ingeniería la necesidad de adquirir un conocimiento funcional de los métodos numéricos y de programación. Resulta obvio que cuando se disponga de programas *enlatados* o subprogramas que han sido probados y demostrado su buen funcionamiento, lo más razonable es utilizarlos. No obstante, es altamente valorable el conocimiento del funcionamiento de tales herramientas, dado que por lo general el usuario de tales programas o subrutinas encontrará dificultades en su utilización. Estas dificultades pueden provenir de múltiples causas. Por ejemplo, es necesario remarcar que los métodos numéricos no están completamente libres de dificultades en todas las situaciones en las que se los utilice. Por otra parte, aún en el caso que no presenten dificultades de cálculo, podrían no funcionar de manera óptima en todas las situaciones que se planteen.

Siempre debe tenerse presente que la exactitud y la estabilidad numérica afectan a la ecuación discretizada utilizada (algoritmo de integración). En la literatura respectiva se han propuesto muchos algoritmos. Varios de ellos, los más comúnmente utilizados, serán analizados en los Capítulos III, IV y XIII. Algunos de ellos trabajan mejor que otros sobre determinados problemas (por ejemplo más rápido y por consiguiente son menos *costosos* para un grado especificado de exactitud). Desafortunadamente no existe un algoritmo que funcione en forma óptima para todos los problemas que se plantean.

Por otra parte, el usuario en búsqueda de una subrutina de cálculo para realizar una determinada tarea, puede encontrar una agobiante variedad de subprogramas que pueden ser aplicables, pero el material descriptivo rara vez dará una indicación sobre la eficiencia de la subrutina para resolver un problema específico. Esto sucede además, en la mayoría de los productos comerciales más elaborados, por ejemplo, para el modelado en ingeniería.

Dentro de este contexto, es muy probable que el ingeniero que espera utilizar un programa *enlatado* o una subrutina de una biblioteca para resolver un problema matemático determinado enfrente dificultades inesperadas, a menos que tenga una preparación adecuada. En efecto, la selección y aplicación de un método numérico en una situación específica, por lo general resulta más una actividad propia de un arte que de una ciencia. Por último, nunca resulta trivial la interpretación de los resultados obtenidos.

Por consiguiente, el usuario que no tenga la habilidad ni el conocimiento para seleccionar y utilizar un método numérico para aplicar a un problema específico y efectuar la programación del método, encontrará una severa restricción en el rango de problemas que puede manejar. En general deberá buscar a alguien con la información necesaria, si es que existe ese alguien a quien consultar. Más aún, en esta situación resultará poco probable que el usuario pueda formular las preguntas correctas y el consultor suministrar las respuestas adecuadas, dado que el nivel de conocimientos de ambos resultaría muy diferente, dificultando la comunicación entre

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ambos.

En síntesis, en los últimos tiempos se ha desarrollado una gran variedad de paquetes informáticos para resolver numéricamente sistemas de ecuaciones que se plantean en problemas de modelado en ingeniería. En teoría, estos paquetes relevan al ingeniero de adquirir conocimientos acerca de los métodos de integración numérica. Supervisan automáticamente los errores y la estabilidad del método ajustando el paso o intervalo de integración para satisfacer un criterio de exactitud. En la práctica, es sabido que estos lenguajes no resuelven todos los problemas. En su puja por generalizar, usualmente se vuelven ineficientes en muchas aplicaciones específicas, por ejemplo, desde el punto de vista del tiempo computacional. En estos casos resulta más conveniente desarrollar un programa *ad-hoc* escrito, por ejemplo, en lenguaje FORTRAN, BASIC o PASCAL.

Con respecto a los productos informáticos que utilizan para el modelado un lenguaje de alto nivel, debe remarcarse que el tiempo de formulación y de resolución del modelo se reduce, en especial para aquellos ingenieros que no dominan métodos de programación y utilizan a la computadora ocasionalmente; aunque se espera que en el futuro cercano, casi todos los estudiantes avanzados y graduados en ingeniería obtendrán un manejo adecuado de lenguajes de programación. Cualquiera sea la situación, es evidente que la utilización de un paquete integrado que facilite escribir un modelo para simulación y permita directamente la resolución numérica requiere el aprendizaje de un nuevo lenguaje y de un nuevo utilitario.

En el caso que se conozca algún lenguaje de programación, dado que las técnicas numéricas programadas de manera sencilla funcionan bien, deberá compararse el esfuerzo que implica desarrollar un programa específico para el problema que se desea resolver, con el uso de programas *enlatados*. En efecto, la experiencia demuestra que es más conveniente el desarrollo propio, ya que no sólo es computacionalmente más eficiente, sino que además garantiza al estudiante o ingeniero el conocimiento de cómo funciona el programa (por ejemplo, un simulador para un equipo dado) y cuáles son las hipótesis realizadas y las técnicas utilizadas. Esta metodología permite la supervisión del programa y su modificación, para manejar de manera más fácil y eficiente nuevas situaciones que se planteen.

Una solución intermedia es programar el modelo particular (sistema específico de ecuaciones a resolver), utilizando para el cálculo alguno de los métodos *enlatados* disponibles para tal fin, aprovechando la disponibilidad de los numerosos paquetes numéricos de resolución, tanto de sistemas de ecuaciones algebraicas como de ecuaciones diferenciales, ordinarias o a derivadas parciales. En muchos lugares (universidades, institutos de investigación, etc.) y en el mercado, se dispone de bibliotecas de subrutinas de cálculo como las IMSL, IBM, Numerical Recipes, entre otras.

En general, para cada rama, tanto de las matemáticas, de la estadística y/o de las aplicaciones de ingeniería, se han presentado en el mercado un gran número

de aplicaciones para resolver muchos problemas de modelado de procesos, tales como diseño, simulación, síntesis, optimización, etc. Además, desde el punto de vista del alcance, los hay diseñados para un uso general así como para uno específico (por ejemplo, hornos, procesos petroquímicos, procesos que manipulan sólidos, sistemas con electrolitos, reactores biológicos, síntesis de moléculas, etc.).

No es el objetivo del presente libro efectuar un análisis detallado del software disponible comercialmente ni de las aplicaciones específicas desarrolladas, ni realizar una descripción exhaustiva de todos los paquetes informáticos existentes, dado que el mercado actual es muy dinámico. Sí resulta importante que el lector adquiera habilidad para comprender claramente el alcance general de los instrumentos computacionales disponibles, las tendencias, la necesidad de disponer de capacidad para generar sus propias herramientas para modelar problemas específicos o para adquirir o utilizar nuevos productos.

En definitiva, existe una acuciante necesidad para que el ingeniero adquiera un profundo conocimiento acerca del funcionamiento de los métodos numéricos y las aplicaciones informáticas, a partir de lo cual, como usuario de computación, podrá seleccionar, modificar, adaptar o programar un método adecuado para cualquier tarea especifica que emprenda; ayudarse en la selección y uso de programas *enlatados* y en subrutinas de bibliotecas y facilitar su comunicación con especialistas en una forma inteligente y eficiente, toda vez que se requiera efectuar una consulta.

I.4 MODELOS NO CONVENCIONALES

Los sistemas a resolver durante la tarea de modelado son muy diversos. Por ejemplo, todo problema de diseño se caracteriza, entre muchos aspectos, por la necesidad de seleccionar una opción óptima (estructura a diseñar, por ejemplo, un edificio, un proceso, un circuito electrónico, etc.) de entre el número (generalmente enorme en problemas reales) de alternativas posibles. Esto implica, por un lado, la necesidad de dominar métodos matemáticos para optimizar una función objetivo, por lo general fuertemente no lineal, con restricciones de todo tipo (desigualdades e igualdades, generalmente no lineales), con variables continuas (reales) o discontinuas (enteras), y por supuesto de muy elevada dimensión. Por otra parte, será necesario comprender conceptualmente algunos de los métodos *formales*, para generar las alternativas estructurales posibles para un diseño dado y seleccionar una de acuerdo con ciertos criterios de óptimo impuestos por el diseñador.

Esta problemática es conocida como *síntesis de procesos* dentro del ciclo de la actividad de diseño. A poco de meditar sobre estas cuestiones, resulta evidente la naturaleza distintiva de este enfoque. En particular, el manejo de *estructuras* como una variable a tener en cuenta, implica un grado de complejidad adicional. En efecto, los métodos matemáticos más comunes con los cuales nos formamos en el ciclo básico de la carrera no son necesariamente los más útiles o *naturales* para encarar la solución de este tipo de problemas. En este primer capítulo introductorio, se tratará

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de analizar someramente diversos ejemplos de *modelos no convencionales* y las herramientas o métodos propios o más naturales para encarar su solución; y por último, la relación entre las citadas estrategias y los lenguajes usuales más comunes para implementar los correspondientes algoritmos computacionales. En el próximo capítulo se discutirán algunos conceptos acerca del problema de síntesis de procesos y su relación con los temas aquí tratados.

Es conocido que el tipo de conocimiento o procedimientos a utilizar para resolver una ecuación algebraica, o bien una integral, por métodos numéricos (Regla de integración de Simpson, por ejemplo), no son similares a la estrategia algorítmica para resolver analíticamente (cálculo simbólico) ya sea la integral como la ecuación algebraica mencionada. El mismo problema se nos presenta si pretendemos elaborar un algoritmo que sea capaz de jugar ajedrez, procesar imágenes clasificando diversos patrones, tener capacidad para la guía de proyectiles, reconocimiento de una firma en un cajero automático, etc.

Resulta evidente que el conocimiento y el tipo de datos requerido para *calcular* un equipo o el diámetro de una cañería no es igual al necesario para adoptar los materiales adecuados para la misma. En efecto, el diámetro, la longitud, etc., surgen del cálculo y/o de parámetros bien definidos, dependiendo su complejidad sólo de la estructura del sistema. Por ejemplo, si existe cambio de fase, de la geometría, etc. La *adopción* de la cañería implica, además de los parámetros calculados en el procedimiento anterior, considerar las características del fluido, como por ejemplo, alcalinidad o acidez, temperatura, presión, si tiene partículas en suspensión y muchos otros factores a los efectos de adoptar el material más conveniente. Generalmente, este conocimiento no puede manipularse ni representarse en ecuaciones matemáticas. Mayores problemas surgen al adoptar una bomba, ya que además de los materiales existen otras características del equipo a definir (centrífugas, alternativas, el tipo de impulsor, etc.).

En el caso de la solución de una expresión integral, debe procederse al empleo de ciertas reglas de integración analítica, en una cierta secuencia, que generalmente no es única, y cuyo orden y metodología depende de cada caso. En efecto, pueden existir múltiples procedimientos para arribar a la solución buscada. La integración numérica, por el contrario, elegido un método de integración, implica una secuencia ordenada de pasos fácilmente codificables. Lo mismo puede afirmarse de la operación de inversión de matrices o la solución numérica de un conjunto de ecuaciones diferenciales, como veremos más adelante, en próximos capítulos.

En definitiva, podríamos plantear numerosos ejemplos de problemas cuyos procedimientos resolutivos no son fácilmente codificables en una secuencia ordenada de pasos (procesamiento del lenguaje natural, selección de alternativas al construir un edificio, búsqueda inteligente en una base de datos, etc.). Para resolver estos problemas se requiere algo similar al *conocimiento experto*, o *inteligencia*. Dado que un programa o algoritmo computacional que logre resolver tales problemas cumpliría

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

con ciertos atributos que le adjudicamos a la inteligencia humana o de los *expertos*, a la rama de la ciencia de la computación que aborda el cómo proceder para resolver este tipo de problemas se le conoce como *inteligencia artificial*. Y a la disciplina de modelado, *problem solving* o resolución de problemas.

Una de las herramientas utilizadas son los *sistemas expertos*, ya que los mismos están diagramados para *emular a los expertos humanos* en la forma en que resuelven los problemas. En general, para enfrentar este tipo de problemas se requiere de una forma de modelar el proceso de generación de estructuras y una forma de codificar y representar el conocimiento de un experto en el dominio en cuestión.

El tipo de conocimiento del cual hablamos, desde un punto de vista lógico, puede representarse y codificarse, entre otras alternativas, bajo las reglas de la lógica de predicados. Por ejemplo, reglas del tipo: *Si la temperatura es muy alta, entonces la válvula debe cerrarse un 30%*, o bien *si el color de la solución es negruzco, entonces hay posibilidad de contaminación en el reactor*, son muy comunes. El formato general es del tipo *Si* $\{A_1 ... A_n\}$ *entonces* $\{C, ... C_n\}$; donde los antecedentes y consecuentes pueden estar vinculados por conectores lógicos (OR, AND, etc.).

En general, un conjunto de reglas (generalmente muy numerosas) como las descriptas puede representar el dominio de conocimiento o *experiencia* acerca de un problema dado. Sin entrar en detalles, utilizado los principios inductivos-deductivos de la lógica de predicados, y asignando valores de verdad o falsedad a ciertas variables (las conocidas inicialmente y las que requiere el procedimiento de razonamiento en la cadena deductiva, si se disponen), puede fácilmente deducirse el estado de todas los demás, o lo que es lo mismo, obtenerse conclusiones valederas acerca de una variante en particular del problema dado.

De esta manera, muy sintéticamente, puede vislumbrarse que este tipo de herramientas puede utilizarse para modelar problemas en los cuales no puede fácilmente codificarse todo el conocimiento del sistema y los pasos necesarios para la solución mediante un sistema de ecuaciones. Por ejemplo, las reglas antes mencionadas son muy útiles para los problemas de adopción de materiales, de equipos para ciertas condiciones, de los métodos más adecuados para estimar propiedades fisicoquímicas dada la composición, temperatura y presión de mezcla, etc. En la bibliografía recomendada se detalla una gran cantidad de aplicaciones en ingeniería que el lector puede consultar.

Llegados a este punto, nos resultará útil analizar el otro aspecto que se nos presenta al modelar ciertos problemas, esto es, herramientas para manipular una gran cantidad de alternativas para un dado sistema. Estas herramientas, combinadas con algoritmos que manejan reglas según el ejemplificado someramente en el punto anterior, y sumado a la capacidad de cálculo de los métodos numéricos, permiten programar poderosos instrumentos para resolver una variada gama de situaciones de ingeniería, las cuales hace sólo dos décadas eran impensables de resolver por computadora.

A continuación se discutirán ejemplos que muestran el proceso de generación de alternativas y el tipo de conocimiento útil para seleccionar la más conveniente.

Representación de problemas mediante la utilización de grafos

Existe un tipo de problema general para el que se conoce con precisión el estado inicial, el estado final u objetivo, y las *reglas* o movimientos permitidos. Dentro de este contexto, cada vez que se aplica una regla o movimiento válido, el sistema cambia de un estado (por el ejemplo inicial) a otro.

El problema consiste en encontrar la secuencia de movimientos o reglas a aplicar (con un sentido de óptimo o esfuerzo mínimo) que nos lleve al estado final u objetivo. Por ejemplo, sea el sistema representado en la Figura (I.2 (a)). En ella se muestra el estado inicial del sistema. En la Figura (I.2 (b)) se muestra el objetivo deseado (se desea ordenar los componentes en forma creciente).



Figura I.2 (a) Figura I.2 (b)

```
Los movimientos se logran desplazando el lugar vacío hacia
la derecha, izquierda, arriba y abajo respectivamente.
```

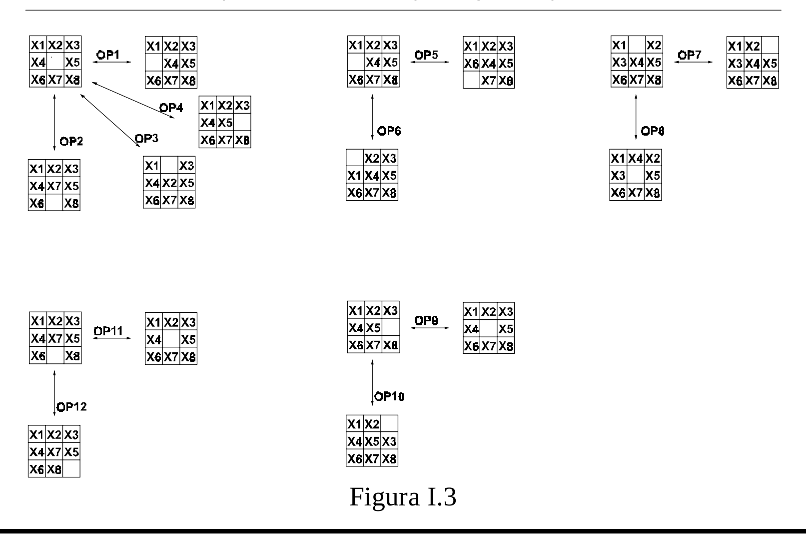


Figura I.3

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Dado el estado inicial del sistema, y el estado final u objetivo, nos faltan describir las *reglas* o movimientos permitidos para lograr transiciones entre estados. Estas reglas también son llamadas *operadores*. Pueden considerarse funciones cuyo dominio y rango son un conjunto de estados. Los operadores o reglas válidas deben ser descriptos, al igual que la representación de los estados, en forma adecuada. Esta forma depende de cada problema. En el ejemplo que nos ocupa, los operadores están descritos en la Figura (I.3). Aquí se muestra que cada elemento en el arreglo puede moverse ocupando el hueco disponible. Es interesante notar que si se encuentra en un borde, las posibilidades de movimientos posibles o *válidos* en cuanto a las direcciones se limitan. Obviamente esto puede plantearse en un lenguaje más formal, pero aquí nos basta con la comprensión de las reglas.

Resumiendo, en la Figura (I.4 (a)) se indica un procedimiento general, mientras que la Fig. (I.4 (b)) se ejemplifican las posibilidades de movimientos u operadores válidos cuando se enfrenta el problema indicado en la Figura (I.2).

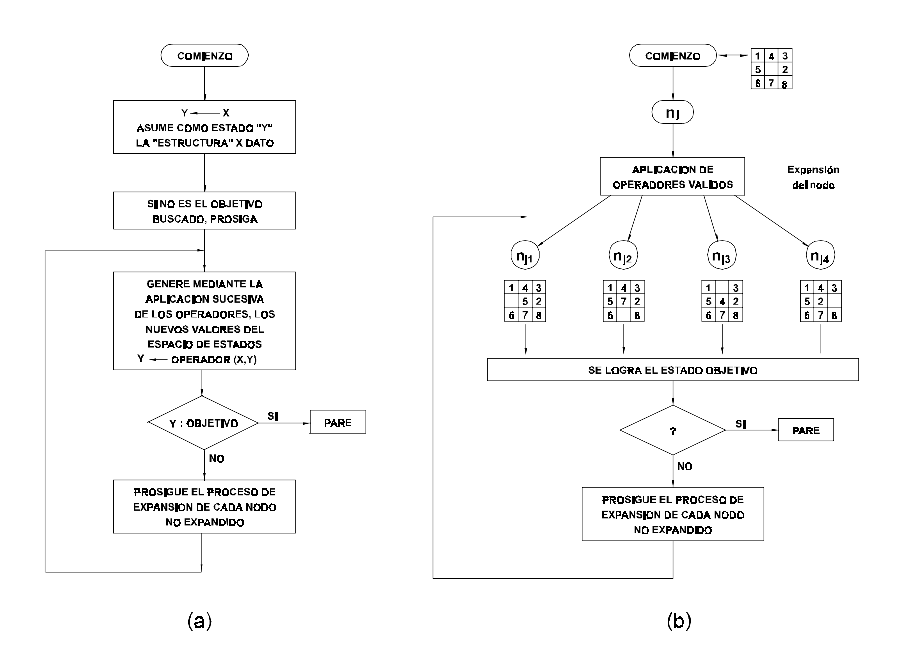


Figura I.4: Expansión de nodos durante el proceso de búsqueda o generación de estados.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Para poder representar la transición entre estados (en el ejemplo que nos ocupa representado por un arreglo o matriz), es conveniente adoptar una metodología conveniente. Para ello resultan muy útiles los grafos.

Un grafo consiste en un conjunto (no necesariamente finito) de nodos. Ciertos pares de nodos están interconectados por arcos. Cuando éstos son dirigidos desde un nodo hacia el otro, se los denomina grafos dirigidos. En un par dirigido (nodo n_i hacia n_j) se dice que el nodo n_j es accesible desde el nodo n_i, siendo éste antecesor y el nodo n_j el sucesor. Así se puede *encadenar* una secuencia de nodos, definiendo un *camino* mostrando los sucesivos pares antecesores-sucesores. Un caso particular de grafo es aquel en el cual los nodos están vinculados de tal manera que puede representarse según una estructura de árbol jerárquico.

El problema de encontrar una política de transiciones de estados (operadores aplicados secuencialmente) puede asimilarse a la de encontrar un camino en el árbol dirigido, en el cual cada nodo representa un estado y cada arco vinculante un operador. Puede pensarse que para aplicar un operador o regla de transición que nos lleve desde un estado a otro debe *pagarse* un costo. El criterio más simple es asignar un costo unitario a cada movimiento, con el propósito de poder contabilizar, y con ello minimizar el número de movidas para llegar desde el estado inicial hacia el objetivo; pero también puede asignarse un costo genérico $C_{ij} = c(n_i, n_j)$ a cada movida. Por ejemplo puede asimilarse como proporcional a la distancia a recorrer entre ambos nodos (en un problema de transporte), o bien un costo en valor monetario, como veremos en el Capítulo II al tratar secuencias de destiladores óptimas, etc. En estos casos se plantea el problema de encontrar un camino desde el estado inicial al final, que minimice el costo.

En la Figura (I.5) se muestra la serie de operadores aplicados a un nodo (el inicial) obteniéndose los nuevos sucesores. Este desarrollo se debe continuar hasta que se logre el suceso, esto es, encontrar la configuración o estado objetivo buscado. Resulta evidente que a medida que el número de elementos a ser ordenados se incrementa, la cantidad de posibles estados (dimensión del árbol que se genera) crece en forma combinatoria. Por ejemplo para 8 elementos se tiene un espacio de dimensiones posible de analizar manualmente, pero para 15 el espacio resulta enormemente superior. Queda claro por lo tanto el concepto de *explosión combinatoria* de alternativas. Este mismo inconveniente surge en cualquier problema de diseño tecnológico, como se discutirá en el próximo capítulo, por ejemplo al diseñar un tren de separación por destilación de una mezcla de muchos componentes, en el diseño estructural de un edificio, etc. Las variantes estructurales son asombrosamente enormes apenas se presenta el problema de seleccionar alternativas. Por lo tanto, para problemas que presentan un espacio de alternativas de elevada dimensión, resulta necesario recurrir a una estrategia de búsqueda que evite explorar a todas al azar, para tender a *minimizar* el costo de la búsqueda, o lo que es lo mismo, el número de nodos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

visitados antes del lograr el estado objetivo buscado. Para ello existen eficientes algoritmos de búsqueda o procesamiento de grafos, de los cuales como ya mencionamos los grafos dirigidos o árboles jerárquicos aquí utilizados son un caso particular.

Un algoritmo genérico de búsqueda podría ser planteado de acuerdo al siguiente esquema (según lo bosquejado en la Figura (I.4 (a)):

1) Asociar el nodo inicial o de partida al estado inicial.

2) Generar los nodos sucesores aplicando los operadores posibles (reglas válidas de transformación de estados). Esta operación (obtener todos los sucesores) se conoce como expansión del nodo. Los arcos que vinculan cada nodo origen con sus sucesores permiten definir el camino seguido desde el nodo (estado) inicial hasta cualquier estado generado durante el proceso de expansión.

3) En cada momento, luego de obtenido un estado, se lo compara con el objetivo deseado: Si coincide, el proceso de búsqueda ha concluido. En este caso el camino que une el nodo inicial con el nodo objetivo es la *solución* al problema. Si no coincide, debe continuarse el proceso de expansión.

El algoritmo arriba descrito es muy general (Figura I.5). Por ejemplo, debe pensarse en un criterio para detener el algoritmo si no encontramos la solución, ya que en casos en los cuales el número de estados es infinito, o bien el punto de partida es tal que no existe una solución, el algoritmo se ejecutará durante un tiempo infinito. Además, debe especificarse el criterio o proceso bajo el cual se expanden los nodos. Por ejemplo, un criterio ampliamente utilizado es expandirlos sistemáticamente en el orden en el cual son generados. Este criterio se conoce en inglés como *breadth-first*, o hacia lo ancho o expansión lateral. Para el ejemplo que nos ocupa, en la Figura (I.6) observamos una expansión bajo este criterio, a partir del nodo inicial. El número en el vértice de cada arreglo indica el orden en el cual los estados son generados.

Otro criterio es el que expande el nodo generado más recientemente. Esta estrategia es conocida en inglés como *depth-first*, o en profundidad. En la Figura (I.7) se indica esta expansión a partir del mismo estado inicial indicado en la Figura (I.6). La profundidad de un nodo se define sumándole uno a la profundidad del antecesor. Dado que en ciertos casos la profundidad alcanzada durante la expansión puede ser muy grande, es preferible acotar la misma con un parámetro de profundidad máxima a explorar o criterio de búsqueda. El criterio podría ser aquel que surge de preguntarse luego de recorrer el camino (rama) en cierta extensión y no haberse detectado la solución, si no es conveniente abandonar la búsqueda y retomarla desde un nodo (o camino) más prometedor. Una vez que se alcanza este nivel cota, o bien se obtiene un estado que no puede expandirse, debe *regresarse* hacia atrás en el árbol y *expandir el nodo más próximo de los antecesores* que permita su expansión. En la práctica, para problemas de muy elevada dimensión (los que generalmente se dan en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ingeniería), explorar un árbol o grafo bajo estos criterios puede resultar sumamente costoso (tiempo computacional).

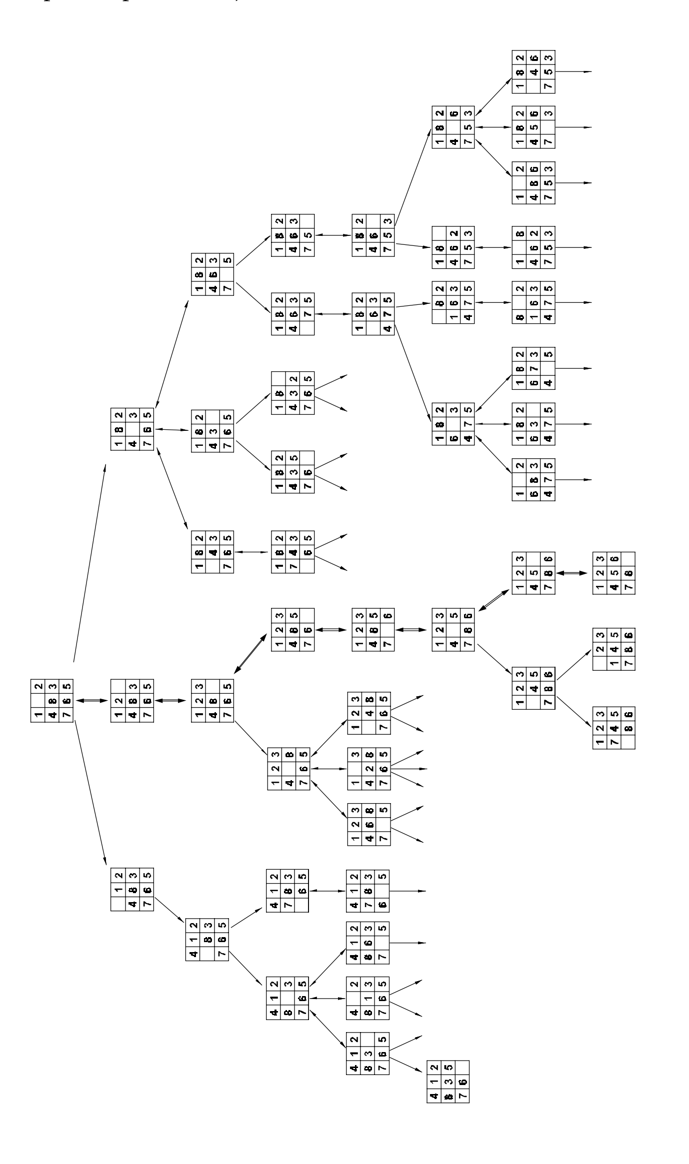


Figura I.5: Ejemplo de expansión del nodo inicial y sucesores. La flecha es el camino hacia el objetivo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Paralelamente, se debe disponer de capacidad de almacenamiento muy grande (para retener los estados intermedios). Por lo tanto, resulta de interés encontrar un criterio o estrategia de búsqueda que minimice el esfuerzo. Para ello se utilizan criterios que se basan no sólo en la configuración o formato de expansión del árbol o grafo de búsqueda, sino más bien en alguna propiedad intrínseca de la solución buscada. Obviamente es muy difícil obtener este criterio a priori. Si pudiera establecerse fácilmente, ello implicaría que *no existe el problema* de búsqueda como tal, y la solución sería trivial. Además, cada tipo de problema contiene características especiales y una buena estrategia para uno, no necesariamente resultará exitosa para otro. Dentro de este contexto surge claramente el tema de la experiencia previa del *jugador* o experto. A este tipo de conocimiento empírico, no analítico, es el que en general se denomina conocimiento heurístico, o *reglas del arte*. Esto da origen a un criterio de *búsqueda heurística*, más asociado al tipo de problema que a la estrategia formal de búsqueda.

De esta manera, ya sea según una estrategia básica de expansión en profundidad o hacia lo ancho (lateral), se expandirán en primer lugar aquellos nodos mas promisorios, esto es, aquellos que sean más adecuados según el criterio heurístico (funciones de evaluación).

Por ejemplo, en nuestro problema puede plantearse como criterio heurístico expandir primero el nodo caracterizado por el mayor número de elementos ordenados (una especie de *medida* de la distancia al objetivo o una aproximación al menor costo de búsqueda).

Existen numerosos criterios para proponer funciones de *costo* o evaluación. Por ejemplo, puede no sólo contemplarse un criterio de búsqueda basado en la *distancia* al objetivo, sino también agregando un criterio de costo *asociado a la búsqueda*, por ejemplo el número de movidas realizadas. Es decir, que pueden utilizarse varios términos contribuyendo cada uno de ellos independientemente. De esta manera puede obtenerse una función de evaluación o criterio de decisión que involucre la *longitud* del camino recorrido hasta un nodo (o la profundidad) a la función anteriormente definida que expresa la *distancia* asociada al mismo. En este caso entonces, y volviendo a nuestro ejemplo en la Figura (I.8), en el nodo origen (profundidad cero), tenemos para el criterio de selección del nodo a expandir, considerando los elementos desordenados y la distancia, el valor de (0+7). En el segundo nivel, la función evaluación adopta para los nodos los valores (6+1), (8+1), y (7+1), respectivamente, dado que la profundidad es uno en todos los casos.

Por otra parte, en la función evaluación, a cada término utilizado puede afectárselo por factores ponderados, o lo que es lo mismo, asignarle peso relativo a cada término que se incluya a la función de evaluación. En efecto, puede plantearse una combinación lineal del tipo $C = \alpha D + \beta P$, donde el costo C es una combinación lineal del costo asociado a la distancia al objetivo (D) y el costo asignado a la profundidad, o camino recorrido (P).

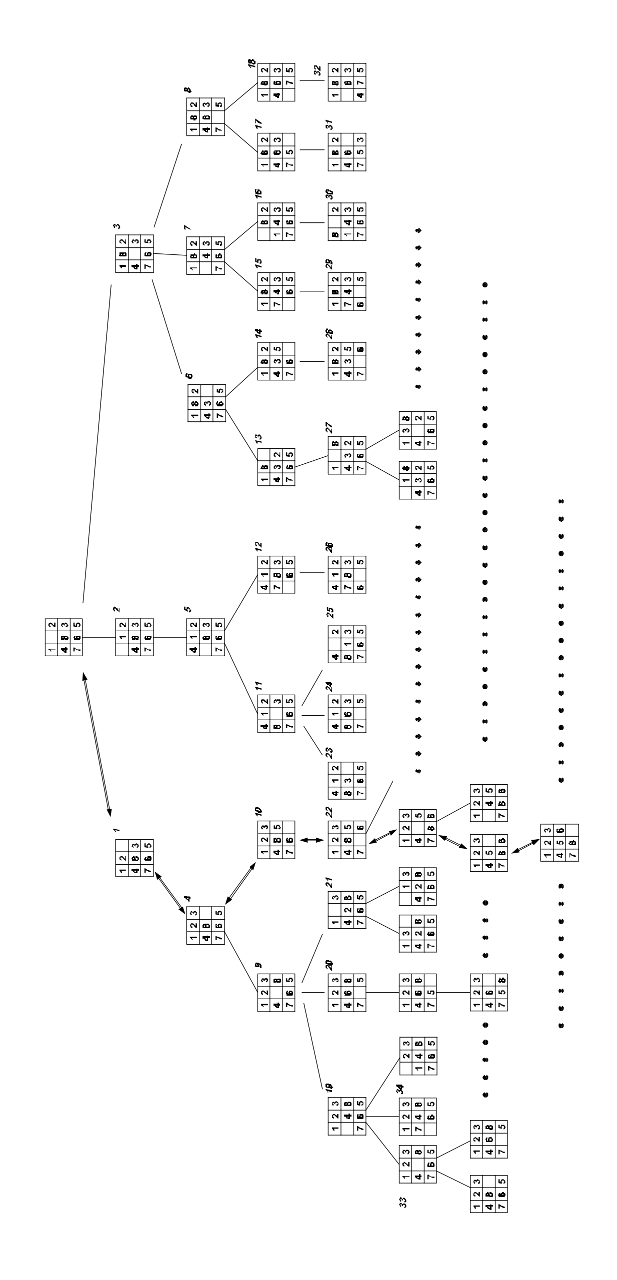


Figura I.6: En este caso se expanden los nodos adoptando la convención de mover el espacio en blanco hacia la derecha, la izquierda, abajo, arriba, en ese orden. Las ramas se recorren desde izquierda a derecha. Los números en el vértice indican orden de generación.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

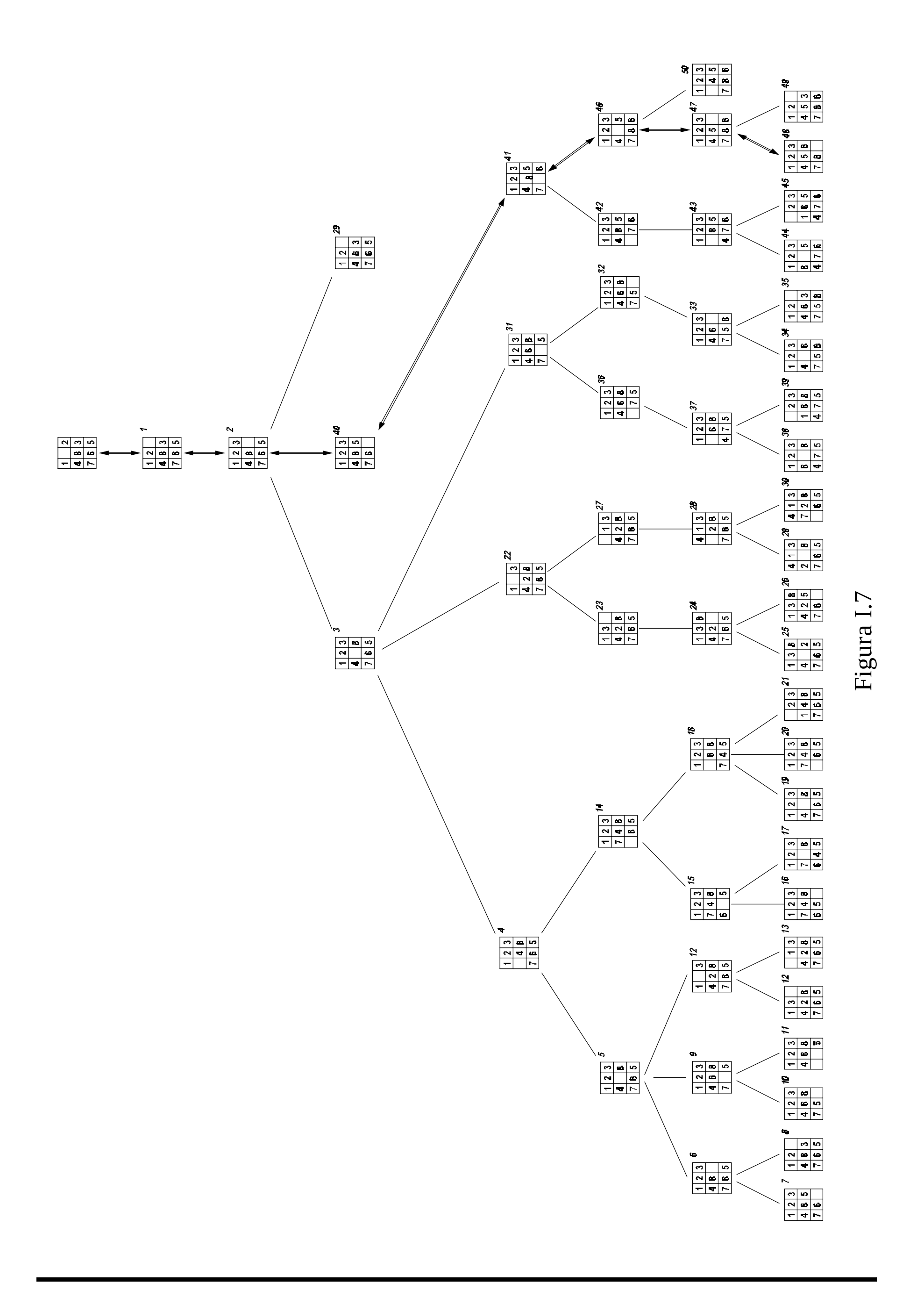


Figura I.7

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

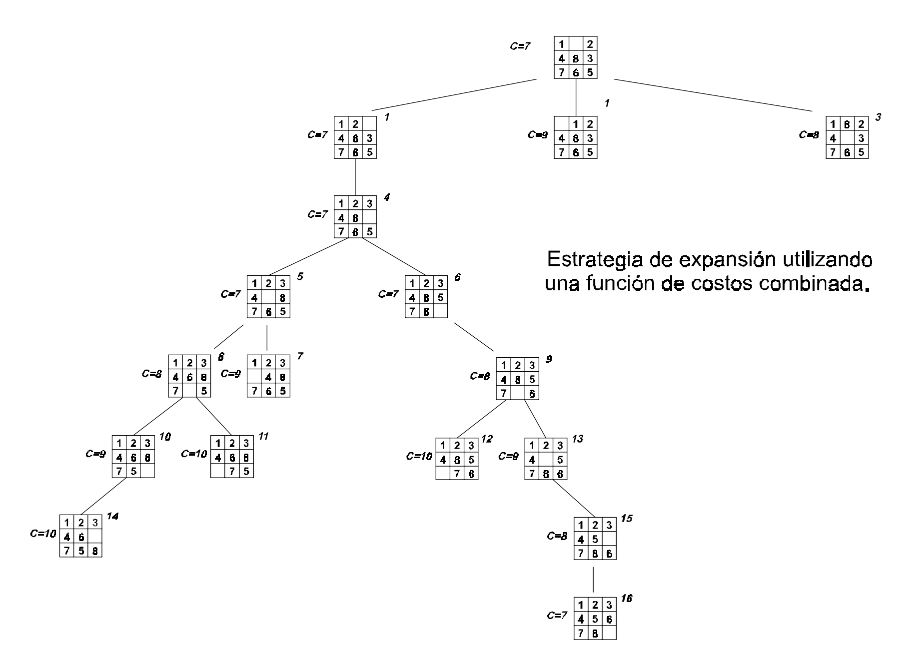


Figura I.8

Los valores α y β son pesos relativos. Puede asumirse valores iguales o diferentes y ello depende de la utilidad práctica de la elección. Como regla general, sólo un método de prueba y error nos brinda los valores óptimos para cada problema en particular. En nuestro caso se han considerado ambos factores de igual peso (la unidad).

En la Figura (I.8) se muestra la expansión utilizando como función de evaluación el criterio recientemente discutido.

Hasta aquí se ha introducido someramente a la problemática, a los efectos de ilustrar diversos procedimientos y criterios para manejar problemas en los cuales se genera un espacio de soluciones combinatorio, esto es, explosivo apenas se incrementa el número de variables a considerar. Estos problemas son muy comunes en varios campos de la ciencia, y en particular, en el diseño en ingeniería. En efecto, ya mencionamos que este tipo de modelos se aplica entre otros, en el análisis de cadenas de símbolos (análisis gramatical), en el análisis matemático simbólico, en el diseño en ingeniería (elegir una estructura entre múltiples alternativas, según se discutirá en el Capítulo II), el problema de generar algoritmos para diversos juegos -ajedrez entre otros-, en el transporte de recursos a diversas ubicaciones con una flota disponible, síntesis de moléculas, etc.

Nuestro objetivo es comprender el tipo de modelo a utilizarse y su asociación con los lenguajes de programación necesarios o útiles para implementar computacionalmente los algoritmos correspondientes. Se sugiere al lector interesado en profundizar estos temas la lectura de la bibliografía indicada al final del capítulo.

Descomposición de problemas complejos. Partición

En general, muchos problemas de elevada dimensión, desde un punto de vista sistémico (teoría de sistemas), pueden ser encarados con cierta ventaja cuando son particionados adecuadamente en diversos subproblemas, cuya solución resulta más fácilmente asequible. Desde luego que deberá obtenerse la solución global como una composición de las soluciones parciales obtenidas. Un ejemplo es el problema (análisis matemático simbólico) de la integración de una expresión dada (integral indefinida). Mientras que ciertas reglas de integración nos permiten fácilmente descomponer un problema en subproblemas (la integral de una sumatoria es igual a la sumatoria de las integrales), no resulta tan sencillo la aplicación de la regla de integración de función de funciones, funciones transcendentes, compuestas, etc. Aquí, si no existen expresiones directamente contenidas en la tabla de integrales, debe recurrirse a ciertas manipulaciones o reglas (por ejemplo integración por partes, sustituciones y procedimientos algebraicos adecuados, etc.). Además, estas manipulaciones no son únicas, por lo que se genera un espacio de alternativas posibles, de las cuales sólo algunas resultarán conducentes a la solución deseada.

Es interesante notar que el problema referido puede representarse estructuralmente de una manera similar al anterior, esto es, utilizando grafos o árboles. Esta representación puede visualizarse en la Figura (I.9) para la siguiente expresión:

$$\int \sum_{k=1}^{n} K_k \, f_k \, (x) \; d \; x$$

Aquí se aplican las reglas de la descomposición de la sumatoria y la multiplicación por una constante. Como se observa, se genera una secuencia de subproblemas en un orden jerárquico que deberá resolverse en la forma establecida (desde abajo hacia arriba) para encontrar la solución global al problema. La estrategia consiste en aplicar las reglas válidas de tal manera de lograr reducir el problema original en subproblemas que puedan resolverse directamente (base). La expansión finaliza cuando esto se logra. Nuevamente, según la expresión a integrar y la metodología elegida, la expansión puede resultar tediosa y de difícil solución, ya que se originarán numerosas alternativas posibles de aplicar.

Resulta imprescindible por lo tanto, disponer de reglas heurísticas propias de la experiencia para proceder a la expansión adecuada, con el menor esfuerzo. Resulta evidente entonces, que la naturaleza del conocimiento o secuencia de pasos a seguir, programar o codificar para resolver diversos problemas, es radicalmente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

diferente. Por ello, si bien las técnicas de búsqueda en árboles y otras de similar naturaleza no son imposibles de ser programadas en lenguajes propios del primer paradigma informático como ser BASIC, FORTRAN o PASCAL, queda claro que debido a la necesidad de manejar procedimientos simbólicos, cadenas de razonamiento lógico, deductivo-inductivo, y conocimiento heurístico, que en general es difícilmente cuantificable, resulta necesario recurrir para encarar este tipo de problemas, a otros lenguajes, más adecuados a los propósitos perseguidos. Éstos se caracterizan por facilitar la programación bajo tales condiciones, tanto en el manejo de los datos como en el tipo de conocimiento a codificar y el tipo de estrategia/razonamiento a emplear. Por ejemplo lenguajes como el LISP, PROLOG, la programación orientada a objetos, y otros paradigmas recientes de programación permiten una base más adecuada para resolver *naturalmente* los problemas recientemente discutidos. Un lenguaje ideal permitiría manejar tanto reglas lógicas como listas y estructuras de datos, paralelamente a la capacidad de manipular todo tipo de operaciones aritméticas sin ninguna dificultad.

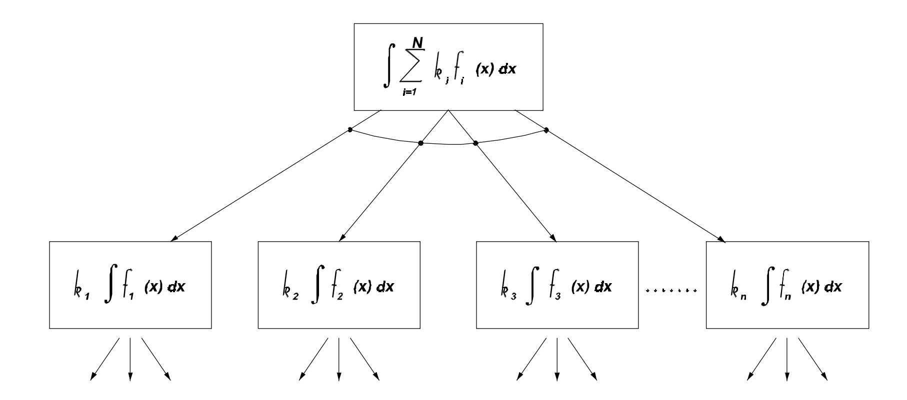


Figura I.9: En este caso, el arco sólido que une los nodos en la expansión es un nodo *and.* Esto significa que deben resolverse todos los nodos de la base (sucesores) para resolver el nodo antecesor.

I.5 SISTEMAS DE GERENCIAMIENTO DE INFORMACIÓN

Hasta aquí hemos analizado someramente diversos tipos de modelos. Aquellos que se caracterizan, por ejemplo, a través de un conjunto de ecuaciones algebraicas o diferenciales, o bien mediante programas matemáticos de optimización, en general de elevada dimensión; para cuya resolución se recurre a algoritmos numéricos programados computacionalmente.

Por otra parte, existen modelos que apelan, como hemos visto, a la

representación del sistema por medio de grafos o árboles. En ellos la representación simbólica prioriza la descripción de los estados del sistema o los eventos a considerar. Este es un gran paso para facilitar el manejo de variables estructurales, manipulación simbólica, partición de problemas en subproblemas más adecuados, etc. También se concluyó que resulta necesario, en ciertos problemas, disponer de lenguajes que permitan naturalmente implementar el razonamiento lógico además del cálculo algebraico. Por ejemplo, vimos que con ellos resulta factible implementar computacionalmente el proceso de decisión para adoptar ciertos equipos, por ejemplo, bombas, intercambiadores, resolver analíticamente integrales, etc. Para ello se *emula* el proceso de toma de decisiones por parte de un experto manipulando formalmente operadores lógicos.

Existe no obstante, otro aspecto que se ha evidenciado progresivamente, a medida que evolucionó el conjunto de tecnologías disponibles. En efecto, el manejo de la información resulta cada vez más importante. Se debe contar con la información precisa, y en el momento justo, para una adecuada toma de decisiones.

Históricamente, a partir de la necesidad de lograr bancos de datos en las reparticiones oficiales (documentación personal, catastros, etc.) y financieras (cuentas bancarias, proveedores, clientes, etc.) entre otros muchos ejemplos, evolucionaron lenguajes de programación y sistemas informáticos aptos para manipular y almacenar grandes cantidades de datos. Los sistemas Administradores de Base de Datos han evolucionado de una manera vertiginosa, permitiendo hoy en día la búsqueda inteligente de información de todo tipo, que paralelamente a la evolución de las telecomunicaciones y transmisión de datos, permiten el manejo de sistemas altamente integrados (por ejemplo la autopista informática, Internet).

Dentro de este contexto, resulta evidente la necesidad de analizar el impacto de estas herramientas en el campo de la ingeniería. Por ejemplo, es obvio que en una empresa de ingeniería dedicada al diseño de procesos químicos (ingeniería básica, de detalle, la construcción y el montaje, etc.) resultará muy importante contar con un sistema informático (montado sobre Administradores de Base de Datos) que contenga la información de las diversas etapas del proyecto, como ser los balances de materia y energía, las hojas de cálculo y especificaciones de cada equipo, el plano de distribución de equipos, cañerías e instrumentos, el cronograma de tareas a realizar, etc. Es obvio que si todos los departamentos estuvieran integrados, la información podría circular con facilidad entre los diversos agentes, evitando así el uso o la dependencia de las clásicas planillas, memos, etc., fuentes de errores e imprecisiones. Además, cada nivel de jerarquía tendrá capacidad para efectuar el acceso diferencial a la información, ya sea en la cantidad y/o en prioridad, por ejemplo, para efectuar modificaciones, escritura y lectura, etc.

En otras palabras, la sistematización de la información y su acceso inmediato es lo que permite al nivel directivo una adecuada herramienta soporte para el gerenciamiento de la empresa, es decir, para la toma de decisiones.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Otro ejemplo puede ser una planta de producción, por ejemplo, una petroquímica. Aquí se genera en tiempo real, segundo a segundo, una gran cantidad de información que se almacena en una base de datos a través del sistema de adquisición de datos. Esta gran cantidad de información, vital para el seguimiento de la planta, es prácticamente la historia de la misma. El problema es que dado que se toma en tiempo real, unas pocas horas de funcionamiento implica un gran esfuerzo de almacenamiento. Por lo tanto debe encontrarse una forma para resumirla y almacenarla adecuadamente. Cada sección (producción, mantenimiento, laboratorios de control de calidad, compras, ventas, stocks, etc.) genera una gran cantidad de datos en tiempo real. Obviamente, un sistema adecuado para manipular los datos, que son de diverso origen y naturaleza, facilitaría enormemente el proceso de *gerenciamiento*, desde la planificación de la producción, hasta la programación del mantenimiento y paradas de equipos.

Dentro de este contexto, *los sistemas para el gerenciamiento de la información* están en la actualidad en constante evolución, con el objetivo de integrar en una herramienta compatible todas las aplicaciones informáticas. El problema es de gran magnitud, ya que como discutimos anteriormente existe una infinidad de aplicaciones, por ejemplo para el cálculo de equipos, simulación y optimización, etc., además de sistemas contables para liquidación de sueldos, *gerenciamiento* de stocks, compras y ventas, proveedores, etc. Por consiguiente, nos interesa remarcar la importancia del acceso a los datos para enfrentar cualquier problema de ingeniería, cualquiera sea su naturaleza, destino u origen.

Se deduce entonces, que también resulta importante, al analizar el lenguaje de programación adecuado para una aplicación, verificar su compatibilidad con diversos administradores de bases de datos y otras aplicaciones, ya que en un futuro inmediato será necesario proceder a integrar de manera progresiva los programas independientes con las fuentes de información general disponibles.

Resulta cada vez más evidente que los problemas a enfrentar en el ejercicio de la profesión (al generalizarse en el mercado todas las herramientas someramente mencionadas en este capítulo) tienden a incorporar elementos característicos de cada tipo de modelo anteriormente analizado.

Por otra parte, también es imperioso realizar cálculos en tiempo real, a los efectos de estimar hacia donde evolucionará el proceso si cambian las condiciones de las materias primas, o bien si la demanda variara súbitamente imponiendo la necesidad de reorientar la producción en función del stock disponible. Para ello también será necesario recurrir a diversos bancos de datos, para obtener información, sean ellos locales o bien remotos, además de la implementación de técnicas de optimización en línea o en tiempo real.

A diferencia del antiguo paradigma de la informática según el cual los programas se consideraban con una estructura rígida, compuestos por una sección de entrada de datos, una de cálculo y finalmente de una de salida de datos, en las

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

aplicaciones de última generación se *fusiona* el nivel de dato con el de cálculo y el de procesamiento o etapa procedural, relativizando una secuencia rígida paso a paso, característica de la programación clásica. En efecto, se busca integrar la capacidad de almacenar y manipular gran cantidad de información con el cálculo numérico y simbólico en una única herramienta.

I.6 PARADIGMAS INFORMÁTICOS

En general, se puede aceptar que la mayoría de los estudiantes avanzados de ingeniería y los profesionales de esta actividad tienen alguna experiencia en el uso de lenguajes como FORTRAN, PASCAL, BASIC o ALGOL. El FORTRAN fue el primer lenguaje para uso científico, siendo en la actualidad el más utilizado para este uso. La aparición de cada nuevo lenguaje o paquete de utilitarios exige por parte del usuario el aprendizaje de un conjunto de nuevas reglas y operatorias. Por otra parte, aunque se presenten ventajas frente a aplicaciones realizadas con lenguajes anteriores, el costo (en dinero y esfuerzo) que implica volcar las aplicaciones al nuevo lenguaje es un aspecto a analizar. Esta es una de las principales razones por las cuales el FORTRAN sigue siendo aún hoy el lenguaje de programación estándar en ingeniería y en otras ciencias duras. Por otra parte, es muy poco probable que sea desplazado en un futuro cercano en aplicaciones de cálculo numérico.

Si bien no es el objetivo de este capítulo analizar la evolución histórica de la informática ni de los paradigmas informáticos y su relación con las herramientas que nos provee (lenguajes diversos de programación con sus características, virtudes y/o aptitudes que los caracterizan), a continuación se vertirán someramente algunos comentarios con el objeto que el lector comprenda claramente la vinculación entre los diversos tipos de problemas que aparecen en el modelado de procesos y su natural correspondencia con alguna herramienta computacional acorde.

En efecto, en la Sección (I.3) analizamos las características salientes o inherentes a los algoritmos aplicables en el campo del análisis numérico y su relación con ciertos problemas de modelado en ingeniería. Vimos que, en general, los lenguajes FORTRAN, BASIC, PASCAL, C o similares, son directamente aplicables y constituyen, en forma general, la opción natural para los mismos, ya que los métodos numéricos no son otra cosa que un conjunto de acciones sistemáticas que deben aplicarse secuencialmente a los efectos de lograr la solución deseada. Estos lenguajes generalmente pertenecen a lo que se ha dado en llamar el primer paradigma de la informática.

Por el contrario, en la Sección (I.4) hemos analizado otro grupo de problemas muy comunes que utilizan grafos y modelos equivalentes para generar un espacio de alternativas a considerar durante el procesamiento. En éstos, si bien no es imposible el manejo de grafos y la implementación de los algoritmos pertinentes con las herramientas o lenguajes anteriormente mencionados, resultan naturalmente aplicables aquellos que posean la capacidad de manejar listas, recursividad, objetos,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

etc. Aquí es importante remarcar que tanto el PASCAL, el FORTRAN o bien el C (C++), han introducido con el tiempo, en mayor o menor medida, tales habilidades.

Finalmente, recordemos que existen problemas en los cuales el modelo asociado contiene reglas lógicas que representan el conocimiento del dominio en cuestión. En efecto, imaginemos que pretendemos diseñar un sistema de control para un proceso determinado. Un sistema clásico de control contempla un diseño basado en la linealización de las respuestas dinámicas del sistema alrededor del estado a controlar. Si las perturbaciones son muy grandes, esta estrategia puede no funcionar, especialmente en sistemas altamente no lineales. En estos casos, deberá recurrirse a algoritmos *modernos* (o no clásicos) de control, como control robusto, adaptativo, etc. Sin embargo, en todos los casos, suponemos que existe al menos un modelo para el sistema (que podemos resolver en tiempo y forma numéricamente), además de poder realizar las mediciones necesarias. Esto no siempre es así: Por ejemplo, ciertos sistemas como los reactores biológicos, hornos o secaderos de cemento, sistemas complejos de cristalización, etc., son decididamente inabordables para el modelado clásico, o bien resultan complejos de abordar a un costo razonable. Sin embargo, habitualmente son controlados por los operadores, quienes han desarrollado una *experiencia* con el tiempo para el manejo de tales procesos. Este conocimiento empírico, heurístico, o de la experiencia, derivado de las reglas del arte, es difícilmente codificable en forma de ecuaciones matemáticas. Por ejemplo, según comentamos genéricamente, reglas similares a éstas pueden utilizarse para controlar un proceso: *Si el líquido está más viscoso o de un color negruzco, entonces aumentar el flujo de agua de enfriamiento en un 30%*, o bien: *Si el sistema vibra, entonces conectar el interruptor I1 rápidamente.*

Este tipo de conocimiento, útil para control, supervisión y diagnóstico de fallas en tiempo real, etc., como ya mencionamos, puede encapsularse o codificarse en reglas del tipo: *Si {...conjunto de antecedentes...} entonces {conjunto de ...consecuentes...}*. En estos casos, resulta natural programar los aplicaciones específicas con lenguajes que incorporen, a las habilidades ya mencionadas hasta aquí, el manejo de reglas. Ejemplos de este tipo de lenguajes según ya comentamos son, por ejemplo, el PROLOG y el LISP. Además, existen en el mercado un número importante de utilitarios que poseen esta capacidad de manejar reglas, no sólo para funcionamiento fuera de línea sino también para el desempeño en tiempo real, esto es, montados sobre una computadora que simultáneamente adquiere datos del proceso. Entre estos últimos pueden mencionarse, entre otros, el G2, el ONSPEC y el GENESYS.

Por último, es interesante destacar que el advenimiento de entornos WINDOWS y utilitarios que agregan facilidades visuales o gráficas, tales como el DELPHI, VISUAL C^{++}, VISUAL BASIC, etc., facilitan enormemente el diseño de sistemas amigables para el usuario, ya sea en programas de simulación como de supervisión de procesos, simulación en tiempo real, entrenamiento de personal, etc.

Nuevamente, se remarca que un lenguaje ideal se caracteriza por facilitar la programación orientada a objetos, facilidades gráficas y visuales, manejar tanto reglas lógicas como listas y estructuras de datos, paralelamente a la capacidad de manipular todo tipo de operaciones aritméticas sin ninguna dificultad y a una velocidad razonable.

Es importante destacar que a lo largo de esta obra no se discutirán aspectos de implementación de los programas en particular así como del software comercial disponible, tanto de aplicaciones como de lenguajes, prefiriéndose enfatizar los aspectos de modelado y los conceptos subyacentes.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Suponga que se requiere implementar un programa para el juego de ajedrez. Suponga que para la representación del conjunto de estados se selecciona una estructura en árbol como la utilizada en este capítulo. Suponga que los operadores son los correspondientes a cada movimiento permitido a todas las piezas, y que además encontró una manera adecuada de registrar el estado del tablero, con la posición de cada una de ellas. ¿Cuando se inicia el juego, cuántas posibilidades de movimientos tienen las blancas?. ¿Sobre este movimiento, cuántas repuestas posibles tienen las negras?. ¿Puede realizarse el programa sin definir adecuadas funciones de evaluación?. ¿Qué información deberían tener dichas funciones?.

P2) Suponga que dispone de una mezcla de NC componentes y la quiere separar mediante una secuencia de columnas de destilación. ¿Cuántas de ellas requiere, si sólo separa un componente en cada una de ellas? (tenga en cuenta que la última procesa una mezcla de solo dos componentes). ¿Cuántas secuencias existen si optamos por cubrir todas las combinaciones posibles? Haga un esquema tipo árbol para una mezcla de 4 componentes. ¿Qué sucede si éstos aumentan progresivamente?.

P3) Suponga que tiene el problema de diseñar la red de intercambiadores de calor que debe proceder a enfriar NF y calentar NC corrientes. Si representa en una matriz por filas y columnas a cada una de ellas, se tiene en principio una forma de estimar la cantidad de distintas posibilidades de intercambio entre ellas, dado que las corrientes de mayor temperatura pueden enfriarse calentando a las de mayor temperatura. Ello ahorra vapor de calefacción y agua de enfriamiento. ¿Puede representarse este problema en una estructura de árbol como la indicada para los anteriores?. ¿Qué sucede si aumentan progresivamente NF y NC ?.

P4) Resuelva nuevamente asignando distintas combinaciones de pesos relativos a la función de evaluación para el ejemplo de ordenado de números. Suponga que la dimensión del problema es nueve, como en el caso tratado.

P5) ¿En qué situación se le ocurre que deba combinarse la exploración en árboles con el cálculo numérico clásico para resolver un problema?. Suponga por ejemplo que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

explora posibles funciones de evaluación para encontrar una secuencia de columnas de destilación de costo óptimo en el Problema (2).

P6) ¿Qué diferencias encuentra entre el cálculo simbólico y el numérico desde el punto de vista de la programación de algoritmos aptos para los mismos?. ¿Cuál es la diferencia fundamental en cuanto a los resultados que nos brinda una y otra filosofía de resolución?.

P7) ¿Por qué motivo es preferible intentar programar un modelo antes que utilizar paquetes comerciales para tal fin?. ¿Cuándo esta estrategia pierde sentido?.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Blanning, W. R. y D. King, *Organizational Intelligence. AI in Organizational Design, Modeling, and Control*, IEEE Computer Society Press (1996).
- Davis, J. F., G. Stephanophoulos y V. Venkatasubramanian Editors, *International Conference on Intelligent Systems in Process Ingenieering*, CACHE, AICHE Symposium Series, Vol. 92 (1996).
- Hollnagel, E., G. Mancini y D. Woods, *Cognitive Engineering in Complex Dynamic World*, Academic Press (1980).
- Negoita, C. V., *Expert Systems and Fuzzy Systems*, The Benjamin Publishing Co. (1985).
- Pearl, J., editor, *Search and Heuristics*, Nort Holland Co. (1983).
- Pyle, I. C., *The ADA Programming Language*, Prentice Hall (1985).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO II

INTRODUCCIÓN AL DISEÑO DE PROCESOS QUÍMICOS. BREVES NOCIONES

Por
Nicolás J. Scenna y Sonia J. Benz

II.1 INTRODUCCIÓN

En el capítulo anterior se discutió someramente acerca de la existencia de distintos tipos de modelos y diferentes herramientas informáticas para implementar éstos. Se comentó que, para el diseño de equipos específicos o bien para la resolución de balances de materia y energía, por lo general, es suficiente aplicar procedimientos analíticos o numéricos apropiados para la resolución de sistemas de ecuaciones, ya sean algebraicas o diferenciales. Sin embargo, también se puntualizó que, cuando el problema es *crear* un proceso o diagrama de flujo para obtener ciertos productos a partir de determinadas materias primas (diseño del proceso), el conocimiento y el tipo de modelos a utilizar, son sustancialmente distintos.

La temática a abordar en los capítulos posteriores está centrada en resolver los balances de materia y energía. La simulación de los procesos químicos, tanto estacionaria como dinámica y, eventualmente, la optimización del sistema conforman el tema central de esta obra.

Por el contrario, el objetivo del presente capítulo radica en la introducción a la metodología de diseño de un proceso, incluso desde la generación de su diagrama de flujo (flowsheet) y estructura. Esto es importante, ya que no resulta apropiado simular u optimizar un proceso si paralelamente no nos cuestionamos acerca de la génesis del mismo o de las reglas que permiten en una forma sistemática, crear y evaluar diferentes alternativas para el diseño, de forma de poder decidir entre ellas de una manera adecuada.

La *síntesis de procesos* es una de las tareas más complejas y exigentes confrontada por el ingeniero químico. Desde un punto de vista pragmático, el uso de técnicas de síntesis de procesos se introdujo lentamente como consecuencia de las condiciones cambiantes en la producción industrial y el surgimiento de tremendos avances productivos y tecnológicos. En este punto, conviene aclarar que la mayoría de los procesos químicos en uso en la actualidad surgieron hace mucho tiempo, cuando no existían métodos sistemáticos para la generación de las estructuras óptimas de los mismos (camino de reacción, redes de intercambio, sistemas integrados, trenes

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de separación, etc.). Resulta lógico pensar, por lo tanto, que estas innovaciones se fueron dando parcialmente, paso a paso, con el transcurso del tiempo. Desde este punto de vista, resulta ilustrativo el análisis de la evolución de las tecnologías utilizadas en los distintos procesos químicos (Rotstein y Stephanopoulos, 1979). En efecto, dado que en todo proceso químico existe la transformación fisicoquímica de materias primas en los productos deseados, se puede calcular el trabajo mínimo asociado (calculado termodinámicamente como un proceso ideal o reversible). Por lo tanto, se dispone de al menos un elemento de comparación, punto de referencia ideal u objetivo a alcanzar. Dicha magnitud sirve para comparar el consumo real de cualquier alternativa con respecto al trabajo mínimo. En este contexto, es interesante observar la evolución de diferentes procesos pertenecientes a diversos campos (no sólo a la industria química) que, mediante la incorporación de nuevos métodos y tecnología en el diseño, han avanzado hacia alternativas más interesantes y próximas a la óptima, respondiendo a la curva sigmoidea comentada en I.1.

Resulta complejo plantear en función de un esquema formal, la actividad de *diseño* en la ingeniería de procesos. En primer lugar y en forma simplificada, se podría afirmar que un proceso químico está vinculado al tratamiento de materiales, mediante transformaciones fisicoquímicas y/o biológicas, y/o procesos de separación física. En forma genérica, se denomina proceso *a la unidad o sistema estructural de transformación por medio del cual los materiales que ingresan se transforman en los productos deseados*. Esta unidad o sistema estructural está compuesto por módulos (equipos u operaciones unitarias), encargados de realizar tareas específicas (separación, calentamiento, reacción química, etc). Los equipos están conectados entre sí por medio de las corrientes que los vinculan, con el objeto de satisfacer la(s) tarea(s) especificada(s) de la mejor manera posible. Para utilizar un lenguaje común, se adopta un simbolismo esquemático que permite visualizar la topología (esquema estructural del proceso), que constituye el diagrama de flujo o *flowsheet*.

Sin embargo, éste poco puede aportar a menos que se especifiquen condiciones de operación (temperaturas, presiones, etc.) y las propiedades asociadas a las corrientes. Existen, por lo tanto, dos grandes grupos de variables que deben ser diferenciadas. En este contexto, llamamos *variables estructurales* a aquellas que están íntimamente ligadas a la estructura del *flowsheet*, es decir, que especifican la presencia de los distintos equipos y su diagrama de interconexiones. Por otro lado, están las *variables de operación* que representan condiciones operativas (temperatura, caudal, presión, etc.), y ciertas características funcionales de los equipos, como ser áreas, número de etapas, etc., por lo general identificadas como *parámetros de diseño*.

De hecho, existen numerosas variantes para el armado del diagrama de flujo de un proceso determinado, como así también, numerosas posibilidades para la asignación/especificación de las variables de operación y parámetros de equipo. El diseñador deberá optar por algún conjunto de ellas, de manera tal de optimizar la

estructura resultante en función de los distintos aspectos funcionales a considerar en la operación de plantas químicas. Nótese que cualitativamente, este problema no es distinto al que enfrenta un arquitecto al diseñar un edificio para ciertos fines, o un ingeniero eléctrico al diseñar un circuito para determinado objetivo.

Por consiguiente, la tarea de diseño lleva implícita *la necesidad de seleccionar* dentro de un espacio de posibilidades, aquellas alternativas que en base a un criterio predeterminado, cumplan con los objetivos deseados. En la búsqueda de lograr un planteo formal del problema de diseño, conviene plantear una *función objetivo* adecuada a ser optimizada. En este punto, conviene explorar los objetivos que se esperan de un proceso químico en general.

Es bien sabido que toda actividad productiva de bienes o servicios se encuentra permanentemente sujeta a un marco de referencia en función del cual se evalúa su factibilidad. Sin pretender analizar los distintos enfoques para cuantificar los beneficios de un proyecto (privado, social, micro-económico, macro-económico, etc.) el marco económico constituye la fuente cuyo *veredicto* resulta inevitable de contemplar en toda actividad de ingeniería. Por lo tanto, costos de operación, inversión, tasa de retorno, etc., son criterios que generalmente se tienen en cuenta en la función objetivo a optimizar.

Ahora bien, no es el factor económico el único componente que define la operabilidad de un complejo o proceso químico. En efecto, existen una serie de aspectos que necesariamente deben ser contemplados, como por ejemplo, *elasticidad* que se refiere a la habilidad del proceso para tolerar condiciones adversas tales como perturbaciones o variación en los parámetros, o *flexibilidad* que se refiere a la capacidad estructural y operativa del proceso para mantenerse funcionando con la mejor performance cuando las condiciones operativas corresponden a un rango de condiciones de diseño, o *controlabilidad*, *confiabilidad*, *impacto ambiental*, etc. Consecuentemente, el problema a resolver es multi-objetivo (Takama y Umeda, 1980). Estos problemas se caracterizan por no poseer una única solución. En efecto, se arriba a un conjunto mínimo de soluciones no dominadas. Por lo tanto, decidir entre las mismas, lleva implícito subjetivamente la *preferencia* del diseñador respecto de los objetivos.

Una característica muy importante a tener en cuenta respecto de la *función objetivo* a plantear en la tarea de diseño, refiere a su facilidad de ser representada (o modelada) matemáticamente. En efecto, si bien existen objetivos expresables como funciones matemáticas (ya sean continuas, discontinuas o discretas), existen aquellos que no pueden ser representados bajo esta perspectiva.

Dentro de este contexto, el problema completo, si es que puede formalizarse, podría ser formulado desde el punto de vista de la programación matemática como uno de optimización múltiple objetivo.

$$\text{Optimice } \{f_1(\underline{\mathbf{x}}),\ f_2(\underline{\mathbf{x}}) \ldots\ldots f_N(\underline{\mathbf{x}})\}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Sujeto a

$$h(\underline{\mathbf{x}}) = 0 \qquad (1)$$
$$g(\underline{\mathbf{x}}) > 0$$

Las funciones $f_1(\underline{x})$, $f_2(\underline{x})$,.......y $f_N(\underline{x})$ representan las N funciones objetivos a optimizar (minimizar o maximizar). Las funciones $h(\underline{x})$ expresan generalmente, las restricciones correspondientes a los balances de materia y energía, mientras que las restricciones $g(\underline{\mathbf{x}})$ expresan zonas de operación factible, por ejemplo composiciones positivas, temperaturas positivas, restricciones propias del proceso, etc. El vector $\underline{\mathbf{x}}$ comprende variables o parámetros de operación y variables estructurales. Una simplificación que se suele adoptar consiste en expresar todos los objetivos en una "única medida", que generalmente es económica. Obviamente, este enfoque, además de ser una simplificación, no siempre es posible. Por último, aún con una única función objetivo, se deben resolver aún los otros problemas, por ejemplo, cómo manejar la variable estructural.

En este contexto, debe encontrarse una metodología adecuada para resolver el problema matemático resultante. Por ejemplo, uno de los métodos propuestos para manejar las interrelaciones que vinculan los equipos entre sí y considerar las variables estructurales consiste en utilizar variables enteras (ceros y unos). Es decir que para considerar simultáneamente las variables estructurales (enteras) y las variables operativas (reales), se acude a la programación matemática mixta (Grossmann, 1985). Por otra parte, las funciones que describen los procesos químicos son por lo general fuertemente no lineales, por lo cual el programa matemático asociado, es obviamente no lineal. Otra característica, no menos compleja, asociada al vector de variables que debe considerarse en el modelado matemático del sistema, es el hecho que varias variables pueden tener un comportamiento aleatorio. Esto es, debido a características inherentes al proceso, factores climáticos o de mercado, etc., las variables de operación no tienen valores únicos y/o fijos sino que pueden fluctuar en torno a un valor estable, normal o nominal, admitiendo cualquier valor comprendido en un determinado rango de incertidumbre. Un ejemplo de esta problemática en la formulación de los problemas de síntesis de redes de intercambio calórico flexibles y de trenes de destilación integrados flexibles, puede verse en Galli (1990) y Benz (1991), respectivamente.

Cabe mencionar que más que interesados en analizar específicamente el problema de optimización, que será abordado en el Capítulo XI y XII, contemplando solo una serie de problemas simplificados relacionados con procesos a estructura dada, aquí nos interesa *bosquejar* la naturaleza del problema cuando es planteado en su forma global, y *resaltar* la dificultad inherente cuando se pretende modelar *todos* los aspectos a tener en cuenta en los procesos reales. Resulta redundante en este punto, afirmar que *en el estado del arte* actual, el problema de diseño planteado

previamente (esto es, optimización multi-objetivo no lineal, con variables de decisión tanto continuas como discretas, variables estructurales, variables aleatorias, funciones no lineales y funciones difícilmente expresables matemáticamente), resulta de solución prácticamente imposible.

Han sido muchos los intentos de resolver, aunque sea parcialmente, el problema global. Sin embargo, todos los métodos propuestos son sólo efectivos para casos de muy pequeña dimensión.

Para las funciones no expresables matemáticamente, así como para el tratamiento de la incertidumbre que involucra la toma de decisiones en áreas subjetivas por parte del diseñador, se están consolidando las herramientas que se basan en el concepto de inteligencia artificial y sistemas expertos, de los cuales una somera idea se ha desarrollado en el capítulo anterior. Sin embargo, si bien se ha avanzado enormemente, las herramientas más recientes sólo cubren aspectos parciales en la tarea de diseño, y no la problemática global en forma unificada.

II.2 ETAPAS EN LA TAREA DE DISEÑO

Para modelar un problema complejo como el descripto, que no es posible resolver basándose en una herramienta o algoritmo matemático que involucre todos los aspectos a considerar en forma simultánea, resulta lógico recurrir a la metodología desarrollada en el campo de la *teoría general de sistemas* (Umeda 1982). En efecto, tal como se expuso en la sección I.4., dada la elevada magnitud y complejidad del problema que nos ocupa, es muy útil adoptar la estrategia de subdividirlo en subproblemas que sean factibles de ser abordados y, a partir de las soluciones parciales generadas, encontrar la solución al problema global.

Dentro de este contexto, las etapas secuenciales aconsejadas para realizar la tarea de diseño, comprenden: (1) la definición del problema, (2) el establecimiento de la función objetivo, es decir, la determinación de los criterios en función de los cuales deben seleccionarse alternativas, (3) la síntesis del sistema propiamente dicha, que implica la génesis del conjunto de alternativas estructurales posibles, y por último, (4) la reducción del espacio de alternativas, seleccionando aquellas que cumplan en forma óptima con las especificaciones establecidas. En consecuencia, *la etapa de síntesis* en el diseño del proceso es el paso creativo que implica la determinación y generación del conjunto de alternativas estructurales posibles capaces de cumplir con los objetivos especificados. Queda claro que la síntesis de un proceso involucra decisiones en dos espacios distintos: (a) el espacio de las diferentes alternativas estructurales, definidas por la topología y la naturaleza de las interacciones entre las unidades; (b) el espacio de los diseños alternativos para cada una de las unidades de operación que componen el sistema. En contraste con la etapa de síntesis, la *etapa de análisis* implica la investigación de las características de cada alternativa generada, por ejemplo, mediante la evaluación de las variables de salida, conociendo las características del sistema y las variables de entrada. Por lo general

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

se utilizan reglas heurísticas con las cuales es posible reducir el número de estructuras generadas en la etapa de síntesis. La *tarea de optimización* se plantea generalmente en la etapa de análisis, y permite seleccionar el mejor sistema entre las alternativas posibles. Por lo general, la optimización del sistema en el primer espacio de decisiones se formula como un problema de programación entera mientras la optimización en el segundo espacio resulta en un problema de programación continua, no-lineal. La naturaleza mixta entero-real del problema de optimización, su no linealidad y su alta dimensionalidad, crea un problema matemático difícilmente superable.

Dentro de este contexto, se comprende que el núcleo central de la tarea de *diseño en la ingeniería de procesos*, de acuerdo a la visión de la descomposición del problema global en sub-problemas o etapas independientes, está constituido por el lazo iterativo *síntesis/ análisis/ evaluación-optimización*. Consecuentemente, no resulta extraño desde una perspectiva histórica, la aparición cronológica de procedimientos o algoritmos para implementarlas, en general como instrumentos independientes. No obstante, aún hoy (y en el futuro a mediano plazo), el alcance de las herramientas o metodologías de implementación masiva propuestas resulta parcial. En efecto, no existe posibilidad práctica de implementar una herramienta efectiva o algoritmo de cálculo, o procedimiento secuencial, que contemple simultáneamente todas las etapas y variables que deben necesariamente ser tenidas en cuenta. Esto podrá revertirse en un futuro, pero dada la complejidad del problema, todavía habrá de dedicarse mucho esfuerzo de investigación al respecto y muy probablemente deberá esperarse bastante tiempo para lograrlo.

Debido a la elevada dimensión de los problemas asociados a la tarea de diseño, su elevado índice combinatorio (propios de la expansión en árboles como en el ejemplo analizado en la sección I.4) y la gran cantidad de información que debe manejarse, la única herramienta viable para tal fin resultan ser los métodos computacionales.

La *etapa de análisis* fue la primera en desarrollarse y manifestarse bajo esta óptica. En efecto, en la década del 70 comienza a consolidarse una línea de investigación que abarca los métodos computacionales en la ingeniería química; en particular la simulación de procesos por computadora o *process flowsheeting*, como una parte de una actividad más general, la actividad del diseño de procesos asistido por computadora (*Computer Aided Design-CAD-*). En forma similar, con respecto a la *etapa de síntesis*, los conceptos utilizados para la construcción de algoritmos se nutren de los más variados campos del conocimiento. Programación mixta, álgebra booleana, termodinámica, computación, sistemas expertos, etc., son algunos de los basamentos conceptuales que dieron sustento teórico a los diversos algoritmos propuestos para la generación de estructuras y la selección de la óptima.

Complementando la idea expuesta más arriba, además de no existir *una herramienta computacional (programa o algoritmo) capaz de resolver el problema*

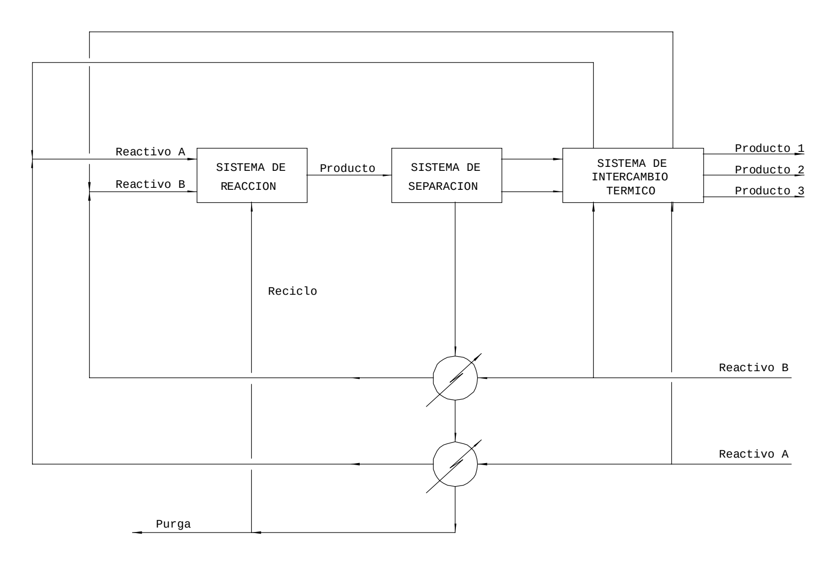
del ciclo completo de actividades en la tarea de diseño, debido a la gran variedad de alternativas que deben contemplarse, *tampoco* existe algoritmo efectivo para la *síntesis de procesos genéricos completos*. A medida que se simplifica (particiona) el problema, es decir, se adoptan subsistemas del complejo a diseñar, los algoritmos propuestos se caracterizan por su mayor contenido formal y su robustez. Tal es el caso de la síntesis de trenes de destilación, con o sin integración energética, sistemas de control, redes de intercambio calórico, caminos de reacción, etc. Sobre estos métodos existe numerosa bibliografía, pudiéndose citar como revisiones relevantes los siguientes trabajos: Hendry y col. (1973), Hlavacek (1978), Nishida y col. (1981),Westerberg (1980), entre otros.

Para ejemplificar el problema, supongamos un proceso genérico que contempla una etapa de reacción a la cual ingresan dos corrientes que contienen los reactivos, y como producto se obtiene una corriente líquida. Como se indica en la Figura (II.1), los reactivos no reaccionados, al igual que los productos colaterales o secundarios deben ser separados de los productos finales. Además, por razones de economía, los reactivos no reaccionados se reciclan al sistema, ya que la conversión no es muy elevada y la reacción, que es exotérmica, está limitada por equilibrio. Dado que los productos deben enfriarse a temperatura ambiente, existe la necesidad de establecer un intercambio calórico para lograr tal objetivo. Con el objeto de recuperar energía, se utilizan las corrientes de productos para precalentar las corrientes que ingresan al reactor. En la Figura (II.1) se esquematizan las secciones genéricas del proceso, tales como el bloque o sección de reacción, el de separación, el de intercambio calórico (representado por los diversos intercambiadores indicados), etc. Este problema es el típico caso con el cual se ejemplifica la necesidad de optimizar una relación de reciclo, ya que los tamaños relativos de los equipos en las diversas secciones, además de la conversión alcanzada y la extensión de las reacciones no deseables o secundarias, son función del mismo.

Dentro de este contexto, plantearse la síntesis del proceso completo implica la generación de las alternativas estructurales correspondientes a todos los bloques especificados. Más aún, se puede plantear además la posibilidad de nuevas materias primas, nuevos caminos de reacción, otras temperaturas o presiones de operación para minimizar reacciones secundarias, etc. Como se desprende y merece remarcarse, el espacio de alternativas a explorar es sumamente extenso, aún para un problema sencillo como el planteado.

Si se particiona el problema global en sub-problemas, se puede plantear la síntesis del sistema de reacción, la del sistema de separación, la del sistema de intercambio calórico, y la de otros subsistemas en forma separada del resto. Este es el único enfoque factible hasta el presente al enfrentar un proceso genérico, y en la próxima sección se discutirán someramente algunos aspectos característicos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



Esquema en bloques de un proceso genérico.

Figura II.1

II. 3 LA TAREA DE SÍNTESIS DE PROCESOS QUÍMICOS

Una vez analizado o introducido brevemente el problema general del diseño de procesos químicos, aquí nos ocuparemos de una de sus etapas, aquella en la cual debemos centrarnos principalmente en la generación de alternativas estructurales eficientes que satisfagan el/los objetivo(s) deseados para nuestro proceso.

El problema de síntesis puede ser definido simplemente como una tarea de invención de la estructura y la determinación de las condiciones operativas del proceso. El término fue definido originariamente por Rudd (1968). La importancia de las estrategias de síntesis de procesos pueden comprenderse tomando en cuenta el hecho que para cada nueva idea o nuevo producto, generalmente sólo menos del uno por ciento sobrevive para lograr el *status* de diseño definitivo o rentable. También es común que para la selección del *flowsheet* definitivo del proceso, se descarten más de 10^{10} alternativas; esto es, durante el proceso de diseño se deben generar (y evaluar) ese número explosivo de opciones. Entonces, es muy fácil comprender la meta: generar herramientas para la síntesis de procesos que minimicen el esfuerzo para crear, evaluar y optimizar todas las alternativas posibles para el mismo, dados sólo unos pocos datos a partir de los cuales el diseño del proceso debe ser originado.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Obviamente, al igual que los heurísticos utilizados en el ejemplo de la sección I.4, deberán encontrarse procedimientos para evitar explorar todos los nodos en la expansión del árbol de alternativas correspondientes.

Más aún, el problema de diseño es *abierto* debido a que es muy difícil seleccionar una solución. Muy probablemente sea posible encontrar (con mayor esfuerzo) opciones competitivas para una solución que se presente como diseño final, ya que como mencionamos, existen múltiples objetivos simultáneos que deben considerarse.

De acuerdo a Westerberg (1980) la *síntesis de procesos* es la actividad de toma de decisiones para conjeturar, por ejemplo, (a) cual de las muchas partes componentes disponibles debieran usarse, o (b) como estas partes deberían interconectarse o ensamblarse para estructurar la solución óptima a un dado problema de diseño. El desafío puede plantearse tanto para crear un nuevo proceso o para mejorar de acuerdo a un dado objetivo, uno existente.

Según vimos, la tarea de diseño involucra un procedimiento iterativo, en el cual la etapa de síntesis está siempre seguida por una etapa de análisis, la cual determina si la estructura y los parámetros propuestos funcionarán como se espera (Stephanopoulos, 1981). Si las metas de diseño no se alcanzan, se requiere un nuevo paso de síntesis para crear o una solución factible o una solución mejorada.

Acerca de las metas u objetivos a alcanzar durante el diseño del proceso, puede mencionarse que la productividad y rentabilidad, además de la confiabilidad, controlabilidad y otros factores son siempre deseados, pero se sabe que son objetivos en competencia. Todos los procesos requieren, por ejemplo, flexibilidad para tener en cuenta el ensuciamiento, la desactivación catalítica, cambios en la alimentación, cambios en la demanda y en las especificaciones del producto, variaciones en la operación estacional, etc. Estas modificaciones en las condiciones operativas del proceso requieren modificaciones en el diseño de muchas unidades (por ejemplo intercambiadores de calor, reactores y separadores). Por otra parte, es necesario analizar la factibilidad del arranque y parada del proceso, dado que en muchos casos buenos diseños nominales deben abortarse debido a problemas insalvables en las citadas operaciones. Finalmente, existe una creciente necesidad de considerar restricciones ambientales en el diseño, dado que aun cuando algunas alternativas parecen prometedoras desde el punto de vista del costo y de la operabilidad, deben eliminarse cuando se analiza el problema de los efluentes. Resumiendo, cuando se plantean varios objetivos simultáneamente, por lo general, éstos se encuentran en conflicto entre sí, y debe adoptarse una técnica para la toma de decisiones óptima en cada caso. Además, para poder encontrar una respuesta válida, debe disponerse de herramientas apropiadas.

Definitivamente y debido a la complejidad del problema, la secuencia de la etapa de síntesis seguida por una de análisis es iterativa hasta que se encuentra un diseño satisfactorio. Ambos pasos pueden involucrar desde el uso de modelos muy

simples a bastante complejos; por ejemplo, técnicas auxiliares de computación que ayudan al ingeniero a manejar variables estructurales (generación de estructuras expandiéndolas en un árbol o método equivalente) y la evaluación de los costos (que involucra el diseño preliminar de los equipos y a su vez implica la resolución de los balances de materia y energía y a veces de cantidad de movimiento) para analizar su viabilidad técnica y económica. Para ello serán necesarias herramientas de simulación estacionaria y/o dinámica, programas de costeo, optimización, programas de diseño de equipos, etc., los cuales serán analizados en los capítulos siguientes.

El objetivo ideal, harto difícil de lograr, es incorporar y crear metodologías eficientes y métodos de diseño automatizados o asistidos por computadora, que contemplen todos estos aspectos en un modelo, implementado en un procedimiento, metodología o herramienta única.

Descomposición del problema en sub-problemas

Cuando se enfrenta un problema complejo, la experiencia y los postulados de la teoría general de sistemas aconsejan una división (partición) del mismo en sub-problemas más sencillos, con una determinada estrategia, para luego componer la solución a partir de las soluciones parciales.

Existen muchas alternativas de descomposición para elegir y lograr una solución adecuada para un problema dado, pero se requiere encontrar la mejor para cada diseño específico. La estrategia de descomposición óptima dependerá del problema de diseño a resolverse.

Las pautas señaladas por Westerberg y col. (1979), también contempladas en la llamada *estrategia de la cebolla* (Linnhoff y Townsend,1982), (Shenoy, 1995) y el enfoque jerárquico de Douglas (Douglas, 1988) entre otros, son ejemplos de procedimientos de descomposición.

De las mencionadas, una de las estrategias más naturales y sencillas de comprender es la propuesta por Douglas (1988). En efecto, se propone que el problema de síntesis y análisis para el proceso completo, definido como una actividad creativa bajo la cual se generan las ideas y se traducen en los equipos y procesos para producir nuevos materiales, puede descomponerse en un enfoque jerárquico. Esta estrategia, como la actividad de un pintor haciendo un bosquejo preliminar, implica evolucionar hacia la solución a través de sucesivos refinamientos de una solución inicial aproximada. Se propone una estrategia de diseño desarrollando en principio, soluciones muy simples para luego agregar capas sucesivas de detalles.

El enfoque jerárquico descompone al problema completo en una serie de sub-problemas usando una jerarquía de decisiones. Para procesos petroquímicos, o procesos donde predominen los sistemas líquido-líquido o líquido-vapor, la jerarquía de decisiones puede sintetizarse muy someramente en los pasos de toma de decisiones secuenciales siguientes:

- Decidir entre procesos batch versus procesos continuos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Decidir la estructura de reacción.
- Adoptar la estructura de entrada-salida del proceso.
- Adoptar la estructura de ciclos del proceso (corrientes de reciclo).
- Adoptar la estructura general del sistema de separación.
- Diseñar la estructura que permita la integración energética a los efectos de minimizar el consumo.

En el caso que se trate de procesos batch o procesos en los que debe manejarse sólidos, es necesario introducir otras secuencias de decisiones (ver Douglas, 1988).

Obviamente, dado que la jerarquía de decisiones es heurística en su naturaleza, es posible incorporar un nuevo orden o nuevos pasos en la estrategia o procedimientos de decisión, luego de acumular nuevas experiencias.

Debe notarse que se fija un orden de prioridades relativas al fijar la secuencia de sub-problemas a resolverse. Por ejemplo, se supone más conveniente preocuparse primero por la estructura de reacción y el flujo de materiales, que por la red de intercambio calórico. No obstante, muy probablemente cuando se llegue a la etapa de diseño de la red de intercambio, deban modificarse decisiones tomadas en etapas anteriores, lo cual implica el ya anticipado proceso iterativo, hasta lograr un diseño final conveniente. Cualquiera sea la estrategia elegida, es importante que cada solución parcial obtenida se verifique considerando el problema completo. Se debe por lo tanto implementar la retroalimentación de la información hacia los pasos anterior y posterior durante el ciclo de etapas de la tarea de diseño (lazo de iteración).

Otra metodología, el modelo de la cebolla - ver Figura (II.2)-, provee una especie de cuadro esquemático de la jerarquía adoptada para la partición del diseño de procesos en diversos subsistemas. Aquí, comenzando con síntesis de los caminos de reacción química, el corazón de la cebolla, se evolucionará hacia el *diseño de la red de reactores*, considerando la selectividad y capacidad. El diseño del reactor y las especificaciones de productos determinarán el *diseño del subsistema de separación (y reciclos)*, que forma la tercer capa de la cebolla.

Las tareas de reacción y separación definen en gran parte los requerimientos de energía y, por lo tanto, la cuarta capa involucra la *síntesis de la red de intercambio energético o de intercambiadores de calor*. Dado que la recuperación de energía entre corrientes de procesos es generalmente insuficiente para encontrar las necesidades de energía total, se requiere de servicios auxiliares externos. Por lo tanto, la quinta capa de la cebolla es el diseño del sistema auxiliar. Para considerar cuestiones de operabilidad (como ser flexibilidad, controlabilidad, etc.) la capa final involucra el diseño del sistema de control. Como se remarcó más arriba, se debe enfatizar que ninguna “capa de la cebolla” puede diseñarse antes de especificar las capas internas. Simultáneamente, las capas internas no pueden lograrse sin diseñar la “cebolla completa” y considerar las interacciones.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

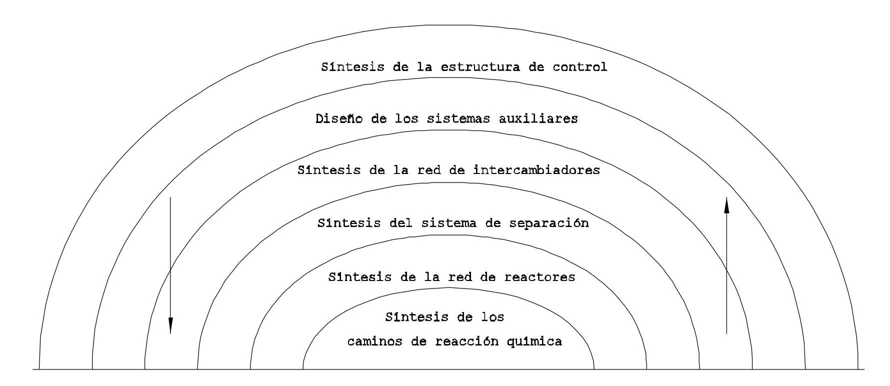


Figura II.2: Modelo de la cebolla

Consecuentemente, se necesitan estrategias *efectivas* -fáciles de usar y adecuadas para obtener las soluciones óptimas- para encarar la síntesis de todos los subproblemas o subsistemas arriba planteados, permitiendo reducir el esfuerzo y tiempo requeridos para completar el diseño completo, esto es, el recorrido ida y vuelta, iterativamente, por las capas jerárquicas indicadas.

De aquí se comprende la importancia de contar con procedimientos efectivos para la síntesis de subunidades de procesos, tales como redes de intercambio calórico, etapas o caminos de reacción, secuencias de destilación (con o sin integración energética), estructuras de control, sistemas de servicios auxiliares, sistemas integrados de generación de potencia y energía, etc.

En este contexto, una de las primeras contribuciones en el área fue la comprensión de los flujos energéticos en los procesos, a través de los trabajos debidos a (Hohmann, 1971), (Linnhoff y Flower, 1978) y (Umeda y col. 1979b) entre otros.

La segunda área fue la síntesis del sistema de separación, abarcando en un principio sólo los procesos basados en destilación de sistemas ideales para lograr , a partir de una mezcla dada, productos puros, a través de las contribuciones debidas a (Hendry y Hughes, 1972), (Rudd y col., 1973) y otros. Luego, el área se extendió hacia la síntesis de sistemas más complejos que incluyen mezclas no ideales, sistemas integrados, etc., según puede juzgarse a partir de los trabajos de (Koehler y col., 1992), (Kaibel y col., 1987) entre otros. Existen también metodologías que contemplan otras técnicas de separación como destilación extractiva, destilación reactiva, evaporación, cristalización, membranas, etc. Obviamente, a medida que se agregan opciones, la dimensión del problema se incrementa velozmente.

La síntesis de secuencias o caminos de reacción para producir un compuesto especificado (o varios) -esto es, la selección de las materias primas y la determinación

de la secuencia de reacciones químicas que transformen materias primas disponibles en el mercado en los productos deseados-, se relaciona con el problema de síntesis del sistema de reactores. Los reactores son el corazón del proceso. Así, la síntesis de este sistema es muy importante. En muchos casos prácticos, la síntesis de las etapas o caminos de reacción (de las diferentes materias primas a los productos deseados) se plantea en forma desarticulada respecto de la síntesis de la estructura de la red de reactores, debido a la complicación que conlleva el diseño unificado desde el punto de vista operacional.

Síntesis de caminos de reacción

Para química fina y de las especialidades, al igual que otros productos, el camino de reacción es un punto clave para sintetizar un proceso factible. Para que un camino de reacción sea comercialmente conveniente debe ser técnica y económicamente eficiente; esto es, la reacción debe poder realizarse en condiciones normales y el valor del producto debe ser superior a los costos involucrados totales. Las principales incógnitas se refieren a la selección de las materias primas a ser utilizadas, a la secuencia en que deben introducirse las mismas y cuáles deberían ser las reacciones químicas a emplearse, para superar la diferencia en la naturaleza de las especies entrantes y salientes.

En la última década se desarrollaron muchas herramientas prácticas para la síntesis de diversos tipos de moléculas, como resultado del desarrollo de la química orgánica e inorgánica, la bioquímica, biología molecular y la biotecnología. (Corey y col., 1969), (Wipke, 1974), (Gelernter, 1973) entre otros, propusieron los primeros métodos para sintetizar moléculas orgánicas. Más tarde, con el objeto de mejorar la eficiencia de las estructuras de producción existentes, (May y Rudd, 1976), (Argnihotri y Motard, 1980), (Govind y Powers, 1981) entre otros, analizaron el mismo problema introduciendo la optimización de costos.

Al plantear el problema de síntesis de los caminos de reacción, se pueden identificar básicamente cuatro objetivos a optimizar:

i.- los costos del sistema de producción resultante (minimizar),
ii.- el número de los pasos de reacción requeridos (minimizar) ,
iii.- la conversión y la producción (maximizar), y
iv.- el uso intensivo de las materias primas básicas (maximizar), (por ejemplo, el carbón el la industria petroquímica).

Se ha avanzado considerablemente en el desarrollo de procedimientos efectivos para generar estructuras de pasos de reacción alternativos. Esas estrategias pueden clasificarse en dos categorías, según empleen métodos analíticos o basados en la información acumulada a través de la experiencia humana. Los métodos basados en el análisis son más recientes y utilizan representaciones rigurosas para la creación e innovación de secuencias de reacción alternativas previamente desconocidas, pero al mismo tiempo, generan un gran número de pasos de reacción obsoletos. Los

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

métodos basados en la información acumulada en paquetes computacionales, permiten generar secuencias que si bien, son atractivas para el diseñador, suelen carecer de *imaginación*, ya que ellos simplemente organizan y sistematizan la química conocida. Sin embargo, con la mejora en los métodos basados en inteligencia artificial se logran herramientas cada vez más potentes y efectivas, tomando las ventajas de ambos enfoques.

Síntesis del sistema de reactores

Una vez que se seleccionaron las reacciones químicas a realizarse en el proceso, debemos sintetizar el sistema de reactores. Esto es, qué tipo de reactores conviene utilizar, (por ejemplo, si son del tipo batch, reactores tanque agitados continuos, tubulares, de lecho fluidizado, etc.), cuántos reactores y cómo deben estar interconectados entre sí y/o con el proceso completo. Entonces, en base al número de pasos de reacción, interesan las interconexiones entre los reactores a ser usados, etc. (Umeda y Ichikawa, 1972). Este problema puede considerarse aislado o contemplando simultáneamente la integración del sistema de reactores al proceso completo desde un punto de vista energético. La síntesis conjunta con las redes de intercambio calórico y sistemas integrados de potencia y energía, o la integración a subsistemas de procesos que intercambian trabajo o energía, generalmente producen mayores reducciones en el consumo, pero son más complicados de resolver.

Síntesis de sistemas de control de procesos

La síntesis de la estructura de control del proceso apunta a determinar cuáles variables deben ser medidas para monitorear completamente un proceso, cuáles variables deben ser usadas como variables manipuladas y cómo deberían relacionarse las variables medidas con aquellas manipuladas (lazos de control) de manera de lograr los objetivos propuestos.

En general, se trata de optimizar algún índice dinámico o estático, indicador de la performance del sistema de control, como por ejemplo, errores en estado estacionario, grado de interacción entre los lazos, velocidad de la respuesta transiente, suavidad de la respuesta, rango de operabilidad, etc. Por otra parte, se han ideado diversas estrategias para generar estructuras de control apropiadas. Por ejemplo, Govind y Powers (1978) plasmaron modelos simples del proceso en grafos causa-efecto y generaron todas las estructuras de control posibles basadas en lazos de control simple, simple entrada y simple salida. Morari y col. (1980) presentaron un desarrollo formal de todas las estructuras de control factibles a través del uso de conceptos generalizados de controlabilidad estructural.

Por otra parte, Umeda y Kuriyama (1978) en base a la descomposición del *flowsheet* del proceso, propusieron primero diseñar estructuras de control individuales para cada unidad y luego realizar sobre ellas los ajustes necesarios para reconciliar cualquier posible conflicto emergente del primer nivel de síntesis.

El espacio de los diseños de estructuras de control factibles se puede definir a través de rangos permitidos en las ganancias del proceso, tiempos muertos, constantes de tiempo, grados de interacción, etc.

Para la síntesis del sistema de control, es importante contemplar en lo posible técnicas que puedan utilizarse *durante* la etapa de diseño del proceso utilizando criterios de operabilidad y controlabilidad, contrariamente a las antiguas estrategias donde la síntesis del sistema de control *seguía* a la síntesis y al diseño del proceso.

Comentadas brevemente las características principales acerca de los métodos de síntesis de las sub-unidades sobre las cuales se han propuesto metodologías implementables, a los efectos de proceder una a una con las etapas descritas en el procedimiento iterativo de diseño, a continuación se describirán con mayor detalle algunos conceptos básicos acerca del problema de síntesis de redes de intercambiadores y de las secuencias o trenes de equipos de destilación, recomendando al lector interesado en complementar estos temas la bibliografía al final del capítulo.

II.3.1 Síntesis de la Red de Intercambiadores

En un proceso, existente o a diseñar, usualmente es posible separar las operaciones tendientes a recuperar calor del resto de las operaciones (por ejemplo, transformaciones químicas, transformaciones físicas, separaciones, etc.). En otras palabras, aquí nos interesa diseñar o sintetizar la estructura *óptima* del bloque de intercambio calórico, estando determinadas las demás funciones del proceso.

Un problema de síntesis de redes de intercambio calórico se define típicamente como sigue:

Dado:

i. Un conjunto de corrientes calientes a ser enfriadas y un conjunto de corrientes frías a ser calentadas.

ii. Las velocidades de flujo y las temperaturas de entrada y salida de todas las corrientes.

iii. La capacidad calorífica de todas las corrientes como una función de la temperatura.

iv. Los servicios auxiliares disponibles y sus costos, además de los costos de capital (inversión en equipos).

Determinar la estructura que se corresponda con el costo total anual mínimo de la red (costos de capital anualizados y costos de servicios auxiliares para los

equipos de intercambio energético).

Notar en este caso que la definición propuesta para este problema basa el criterio de búsqueda en un factor económico (costo total anual), no considerando otras condiciones, como por ejemplo, operabilidad, flexibilidad, seguridad, etc.

Con el objeto de encontrar una formulación adecuada para resolver este problema, se debe elaborar alguna estrategia que permita generar e identificar las redes de intercambio calórico que minimicen tanto el consumo de servicios de calefacción y enfriamiento (costo operativo), como el área de intercambio calórico y el número de unidades (principales componentes que contribuyen al costo de capital fijo) en la red, todo esto sin recurrir a una enumeración exhaustiva de todas las posibilidades ya que de esta manera sería una tarea harto consumidora de tiempo de cómputo (piense en un problema con cientos o miles de corrientes a empalmar entre sí).

Dentro de este contexto, conforme a sus necesidades o disponibilidades energéticas, las corrientes materiales que intervienen en el proceso se pueden clasificar en frías y calientes. Esta clasificación no se basa en las temperaturas de las respectivas corrientes sino en las tareas que hay que efectuar sobre ellas. De este modo, se designan como corrientes calientes a aquéllas que deben liberar energía y como corrientes frías a aquéllas que deben recibir un flujo calórico. Conviene tener presente que de acuerdo con estas definiciones, algunas de las corrientes frías pueden tener mayor temperatura que otras clasificadas como calientes.

En la Figura (II.3) se representan dos corrientes calientes (C_1 y C_2) y dos corrientes frías (f_3 y f_4), y sus respectivas temperaturas de entrada y salida (metas). En la tabla asociada a la Figura (II.3), se indican además, los flujos de capacidad calorífica para cada corriente (el producto del caudal -F- por la capacidad calorífica Cp de cada corriente, en unidades acordes). Las temperatura de entrada y salida ($T_{i,e}$ y $T_{i,s}$) de las corrientes calientes y las temperaturas de entrada y salida ($t_{i,e}$ y $t_{i,s}$) de las corrientes frías, determinan *intervalos de temperatura* entre dos valores consecutivos. Las flechas indican el sentido de evolución de la temperatura (calentamiento para las corrientes frías y enfriamiento para las corrientes calientes). El problema consiste en encontrar el conjunto de intercambiadores de calor a instalar entre las corrientes de forma que se alcancen las especificaciones de salida, detallando además, los intercambios intermedios (entre cuáles corrientes y en cuáles intervalos de temperaturas), los consumos de agua de enfriamiento y vapor de calefacción si los hubiere, etc., de tal forma que el costo total anualizado sea mínimo.

Por consiguiente, una vez identificadas las corrientes y sus propiedades, y las tareas a efectuar sobre el sistema de intercambio calórico, la solución para el problema de síntesis es encontrar la política de acoplamiento óptima usando intercambiadores de calor proceso-proceso (C_i, f_j) y calentadores y/o enfriadores (consumo de servicios auxiliares, esto es, por ejemplo, vapor de calefacción o agua de enfriamiento).

Tipo y Número de Corrientes de Proceso	Temperatura de Entrada (°C)	Temperatura de Salida Deseada (°C)	Flujo de Capacidad Calorífica (Kcal/°C)
1 (Caliente)	$Te_{,1}$	$Ts_{,1}$	FCp_1
2 (Caliente)	$Te_{,2}$	$Ts_{,2}$	FCp_2
3 (Fría)	$te_{,3}$	$ts_{,3}$	FCp_3
4 (Fría)	$te_{,4}$	$ts_{,4}$	FCp_4

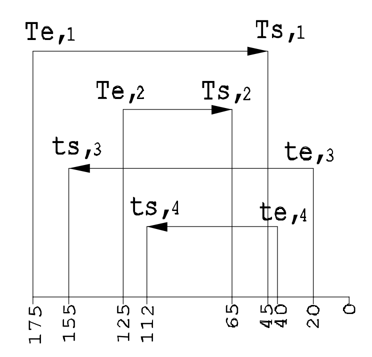


Figura II.3: Conjunto de corrientes y sus propiedades para la definición del problema de síntesis de intercambiadores de calor.

Es fácil comprender que ante un número grande de corrientes calientes y frías, el número de posibles combinaciones entre ellas (con la posibilidad de dividir algunas corrientes) es explosivo (similar al comportamiento en el ejemplo analizado en la sección I.4). Por lo tanto, se requiere generar una estrategia de síntesis adecuada.

La primera contribución para resolver el problema fue realizada por (Hohmann, 1971). Usando un diagrama (T-H), esto es temperatura versus calor intercambiado (o variación de entalpía), se determina en forma sencilla la mínima cantidad de servicios auxiliares (considerando su nivel térmico) necesaria para satisfacer la demanda energética de la red. En el diagrama T-H se representa la curva

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

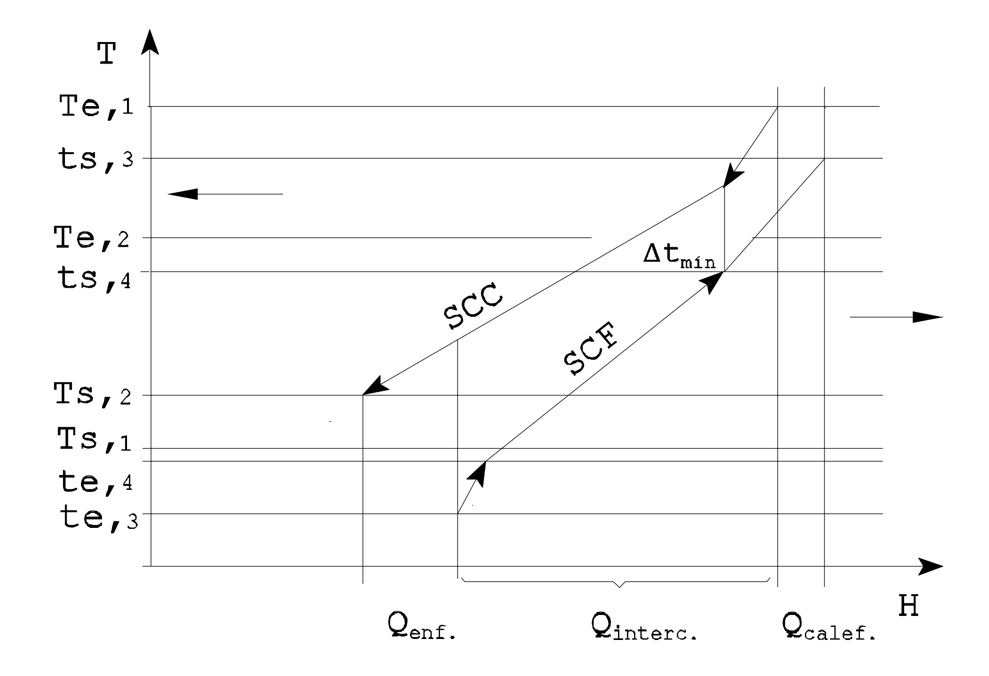


Figura II.4: Diagrama T-H para representar la evolución de las SCF y SCC.

de calentamiento de una corriente *compuesta* fría (llamada supercorriente fría - SCF-) y que engloba a todas las corrientes frías a ser calentadas en el proceso contra una curva de enfriamiento de la corriente *compuesta* caliente (supercorriente caliente, SCC) que engloba a todas las corrientes calientes a ser enfriadas. Ambas supercorrientes se obtienen, a lo largo de cada intervalo de temperaturas identificado, mediante la suma de todos los flujos de capacidades caloríficas de las corrientes individuales en cada intervalo. La importancia de esta definición radica en la posibilidad de representar sencillamente, a través de un esquema, los parámetros de la red total.

En la Figura (II.4) se puede observar una evolución cualquiera de ambas supercorrientes en el diagrama T-H, correspondiente al ejemplo de la Figura (II.3), tomando valores particulares para los flujos y capacidades caloríficas, así como temperaturas de entrada y salida para cada corriente. Para construir la figura basta con recordar que el calor intercambiado $Q_{int} = \Delta H$, es simplemente el producto de las diferencias de temperaturas por el flujo de capacidad calorífica (caudal másico por calor específico). Luego, la pendiente de la recta que representa la evolución en el

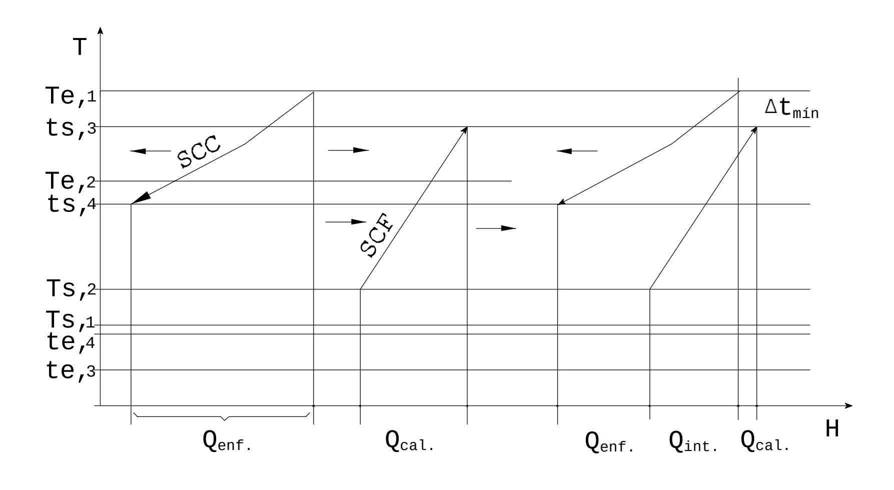
diagrama T-H es la inversa de esta última. Para cada intervalo de temperatura, las pendientes de las supercorrientes se obtienen como la sumatoria de los productos del flujo másico y la capacidad calorífica, tanto de todas las corrientes frías como las corrientes calientes en el intervalo, respectivamente.

Dado que el calor fluye desde una temperatura mayor hacia otra menor, es posible satisfacer la demanda de calentamiento de las corrientes frías con la energía disponible en las corrientes calientes, mediante el solapamiento de ambas corrientes (la SCC por encima de la SCF). Puede observarse que, la proyección sobre el eje de entalpía implica un intercambio de calor equivalente para ambas supercorrientes. Por lo tanto, si se adopta el máximo solapamiento posible y se define una aproximación de temperaturas mínima permitida $\Delta t_{mín}$ (para asegurar una fuerza impulsora a la transferencia de calor), se puede calcular fácilmente la cantidad de calor que deberá ser agregada a la red mediante el servicio de calefacción (si no existiera disponible a través de la supercorriente caliente), y la cantidad de energía a ser extraída del sistema mediante el servicio de enfriamiento necesario (si no existiera disponible a través de la supercorriente fría), para llevar a las corrientes a la temperatura especificada.

En la Figura (II.5) se indican las proyecciones sobre el eje de entalpia que determinan el calor intercambiado entre dos supercorrientes cualquiera (Q_{int}), y los servicios de calefacción (Q_{cal}) y de enfriamiento (Q_{enf}). También se indica el valor del acercamiento de temperaturas mínimo permitido ($\Delta t_{mín}$).

En función de las hipótesis adoptadas, debe interpretarse que el intercambio de calor se lleva a cabo en una especie de *superintercambiador*, que involucra a las supercorrientes fría y caliente, al igual que los respectivos servicios. Debe notarse una propiedad interesante que surge de la forma en que se construye la Figura (II.5). En efecto, dado que el calor cedido o incorporado por una corriente puede medirse por la proyección del segmento determinado por la evolución entre la temperatura inicial y final (ΔH en la Figura (II.5)), se observa claramente que cualquier desplazamiento hacia la derecha o izquierda no altera la cantidad de calor intercambiado *por cada supercorriente*. Sin embargo, resulta evidente que sí lo hace el calor intercambiado *entre las supercorrientes* ya que sólo cuando existe solapamiento entre ambas (en el sentido vertical) se puede asumir que el calor *cedido* por la SCC es *absorbido* por la SCF. De esta manera se evita la situación que representada en la Figura (II.5-a-) ya que al no existir solapamiento alguno, ambas supercorrientes deben satisfacer su demanda mediante el consumo de servicios auxiliares de enfriamiento y calefacción, respectivamente. Esta es la situación de máximo consumo y de mínima recuperación energética.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



(a) (b)

Figura II.5: Calor Intercambiado entre la SCC y la SCF en un diagrama T-H.
(a) No existe solapamiento (máximo consumo de servicios auxiliares).
(b) Máximo solapamiento (máxima recuperación energética).

Por lo tanto, si el objetivo es lograr mínima demanda de servicios auxiliares o, en forma equivalente, máxima recuperación entre corrientes, el mismo se obtiene cuando existe máximo solapamiento entre ambas curvas. Esta situación es sencilla de lograr en el diagrama T-H. Es suficiente desplazar lateralmente ambas supercorrientes, de forma de lograr máxima superposición entre curvas (Figura II.5b), considerando el mínimo acercamiento vertical permitido entre ambas curvas. Obviamente, existe una cota para la recuperación energética. Esto es, cuando Δt tiende a cero, no puede, en el límite, continuarse. Esto surge de dos restricciones. Por un lado, el segundo principio de la termodinámica postula que el calor fluye desde una temperatura mayor hacia otra menor (salto térmico, $\Delta t \geq 0$), y por el otro, en todo sistema real la fuerza impulsora debe ser finita ($\Delta t > 0$), ya que de lo contrario el proceso sería infinitamente lento.

Usualmente se designa al punto de mayor aproximación de las curvas, como el *pinch* del problema. (Linnhoff y Flower, 1978) y (Linnhoff y col., 1982) analizaron las características del *punto pinch* en el proceso de transferencia de energía. Al punto de contacto ($\Delta t = 0$, y por extensión tambien finito) entre ambas supercorrientes en el diagrama T-H se lo definió como punto *pinch*. Se ha probado que el punto *pinch*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

divide al proceso en un sumidero de calor (temperaturas por encima del punto de *pinch*) y una fuente de calor (temperaturas por debajo del punto de *pinch*). Estos autores han probado que no debe existir flujo de calor (intercambio calórico) atravesando el punto *pinch*. Esto es, no debe transferirse calor desde las corrientes arriba del *pinch* hacia las corrientes debajo del mismo, ya que de hacerlo, debe incrementarse exactamente en la misma cantidad el consumo de ambos servicios auxiliares de calefacción y enfriamiento, por encima del mínimo requerido. El método de diseño *pinch* propuesto por (Hindmarsh y Linnhoff, 1983), reconoce este hecho y considera el diseño de dos problemas separados (debajo y arriba del *pinch*). Este procedimiento permite generar redes de máxima recuperación energética que cumplen con las metas especificadas.

Los costos operativos (C_{op}) dependen de los requerimientos de energía y están dados por:

$$C_{op} = (c_{enf}\ Q_{enf,\,min}) + (c_{cal}\ Q_{cal,\,min}) \qquad (2)$$

donde c_{enf} y c_{cal} son los costos unitarios de las cargas de servicios auxiliares de enfriamiento y calentamiento, respectivamente. La determinación de $Q_{cal,mín}$ y $Q_{enf,min}$ puede realizarse a partir del diagrama T-H (ver Figura (II.4) y Figura (II.5)); o bien mediante procedimientos computacionales (ver Cerdá y col.(1983); Shenoy (1995)).

El costo total de la red a diseñar comprende básicamente los costos operativos y el costo de capital.

La evaluación del costo de capital total (C_{cap}) se basa en la siguiente expresión genérica, correspondiente al cálculo del costo de un intercambiador de calor simple:

$$C_{cap} = a + bA_t^{\,c} \qquad (3)$$

donde $A_t = \sum A_i$, i indica el número de unidades utilizadas en la red, y *a*, *b*, y *c* son los coeficientes asociados a la relación de estimación de costos en función del material de construcción, la presión de trabajo y del tipo de intercambiador. Debido a que se desconoce la distribución del área del *superintercambiador* (que engloba a todas las unidades de intercambio) entre los intercambiadores reales de la red, puede asumirse que todos los intercambiadores individuales son del mismo tipo y están construídos con los mismos materiales. Además se asume que se logra el diseño de la red utilizando el mínimo número de unidades posible, ya que este factor también influye en el costo de la misma. De esta manera, el costo total de la red es proporcional al área total de intercambio utilizada.

Finalmente, para el cálculo del costo total (C_{tot}), se deben sumar ambas contribuciones, considerando la vida esperada de la planta y la velocidad de retorno del capital invertido.

$$C_{tot} = C_{op} + C_{cap} \qquad (4)$$

De la ecuación anterior se desprende que para minimizar el costo total se debe minimizar la inversión y el costo operativo.

En la Figura (II.5-b) se aprecia que, adoptado el parámetro Δt_{min}, o acercamiento mínimo de temperatura permitido para el intercambio, se puede calcular los mínimos requeridos tanto para el vapor de calefacción como para el servicio de enfriamiento. En efecto, la máxima superposición (que implica empalme en sendos intercambiadores de las supercorrientes correspondientes) proyecta el mínimo consumo de servicios. De esta forma, de una manera muy sencilla y elegante pueden calcularse, para cada valor adoptado de Δt, los servicios mínimos requeridos.

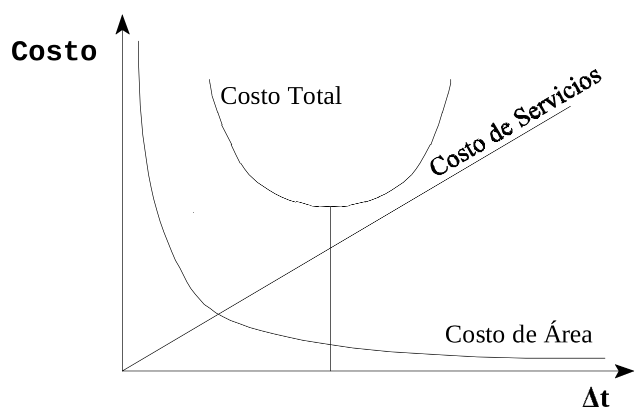


Figura II.6: Costo total anual en función del salto térmico mínimo permitido Δt.

Por otra parte, a medida que disminuye el parámetro Δt, también lo hace la necesidad de calefacción $Q_{cal, min}$, yla necesidad de agua de enfriamiento $Q_{enf, min}$. Esto, como vimos tiene un límite, que se alcanza cuando Δt_{min} tiende a cero. En efecto, el consumo de servicios es el mínimo respecto de todos los posibles, pero simultáneamente, el área resulta infinita, ya que si se observa atentamente la Figura (II.6), la fuerza impulsora para el intercambio calórico es directamente proporcional al parámetro Δt. En efecto, como se sabe, el área de intercambio responde a la fórmula:

$$A_t = Q/ (U\ \Delta t_{ml}) \qquad (5)$$

en la cual Δt_{ml} (promedio logarítmico de la fuerza impulsora) es proporcional a la diferencia de temperaturas entre los extremos de intercambio, y tiende a cero cuando Δt_{min} tiende a cero.

Por lo tanto, para cada asignación de Δt_{min} tenemos por un lado un valor correspondiente del área total de intercambio, y por el otro, recurriendo a la superposición indicada, el valor mínimo de los servicios asociados. Con todos estos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

valores resulta sencillo construir, paso a paso, con el solo expediente de variar Δt_{min}, la Figura (II.6). En ella se indica la variación del costo de los servicios (Ecuación (2)) que resulta creciente con Δt_{min}, la variación del área total de intercambio, que por el contrario se incrementa con la disminución del valor Δt_{min}, y por último la suma de ambos (Ecuación (4)). Dada la forma de las curvas de los sumandos parciales, la curva de costo total generalmente presentará un óptimo para un valor determinado de Δt_{min}. Este es el valor correspondiente al acercamiento óptimo para la red de intercambio a diseñar (Townsend y Linnhoff, 1983).

Por último, es necesario *desagregar el superintercambiador* en un conjunto de unidades de intercambio entre las corrientes individuales, tratando de minimizar su número, y diseñar los equipos de intercambio calórico con el objeto de minimizar el costo total. Existen varios procedimientos para lograr este objetivo, pero los mismos están fuera del alcance de esta introducción al tema, y se recomienda al lector interesado explorar las citas bibliográficas (Townsend y Linnhoff, 1983), (Linnhoff y Flower, 1978), (Linnhoff, 1994) entre otros, y la bibliografía recomendada que se encuentra al final de capítulo.

Obviamente, se han introducido en el planteo propuesto varias suposiciones. Por ejemplo, entre otras, el área de intercambio se calcula suponiendo un valor constante para el coeficiente pelicular de intercambio U en toda la red. Existen métodos para contemplar esta variación (Nishimura , 1980).

No obstante, resulta interesante destacar que la estrategia analizada es sumamente sencilla, aún para un número muy importante de corrientes frías y calientes en la red a diseñar. Además, los resultados logrados resultan realmente aproximados a la solución óptima global. Obviamente, para problemas que abarcan cientos o miles de corrientes, proceder manualmente para determinar el Δt óptimo, y luego la estructura de intercambiadores real, es prácticamente imposible. Es por ello que se han propuesto numerosos algoritmos implementados en computadora, como por ejemplo (Cerdá y col. 1983), (Grossmann, 1985), (Linnhoff y col, 1982). Además, existe en la actualidad software comercial que permite enfrentar el problema de la síntesis de la red de intercambiadores y su relación con las otras secciones del proceso, mientras que a su vez, tienen compatibilidad para integrar los resultados provistos con las entradas necesarias a un simulador de procesos, de tal forma de facilitar la tarea iterativa clásica de la síntesis del proceso global. Por otra parte, Galli y Cerdá (1991) entre otros, han desarrollado además una metodología de síntesis de redes de intercambio calórico flexibles, cuya topología le permite operar a la red con el mínimo costo operativo cuando las temperaturas de entrada y salida de las corrientes varían dentro de rangos dados.

Sistemas combinados de generación de potencia y recuperación energética

A partir de las propiedades del punto *pinch*, (Hindmarsh y Linnhoff, 1983) analizaron la posibilidad de integrar adecuadamente la descarga de calor de máquinas

térmicas a las redes de intercambiadores, utilizándolas como fuente de calefacción. En efecto, una máquina térmica consiste en un dispositivo que operando en ciclos produce alteraciones en el medio ambiente, que se traducen en intercambios calóricos y producción o consumo de trabajo, variables que se relacionan entre sí por medio de la primer y segunda ley de la termodinámica (eficiencia de Carnot). Considerando el proceso (red de intercambiadores) como parte del medio ambiente, se puede analizar la integración del sistema de generación de potencia (ciclos) con la red de intercambiadores, de tal forma de lograr una estructura óptima. (Linnhoff y Flowers, 1983) analizan las reglas para integrar ciclos productores de potencia (o consumidores) con la red, en base a las propiedades del punto *pinch*. Se prueba que no todas las posibilidades son adecuadas, y en las que lo son, se logra reducir el consumo energético del sistema integrado aumentando la eficiencia global. En efecto, se puede lograr en ciertos casos, que todo el calor consumido por la red de intercambio *pase* a través del ciclo produciendo trabajo con un rendimiento marginal del 100%.

Por otra parte, se han desarrollado otros enfoques para abordar el problema de síntesis de sistemas combinados de potencia y recuperación de calor, considerando por ejemplo, la generación de entropía del proceso como en el método de la *línea de operación* (Irazoqui, 1986). No obstante, no analizaremos aquí en profundidad el tema, remitiendo al lector a la bibliografía recomendada al final del capítulo.

II.3.2 Síntesis de Sistemas de Separación

La necesidad de utilizar equipos de separación en los procesos químicos es bien conocida. En general, es necesario aislar los productos purificados, recuperar subproductos valiosos, preparar materias primas y/o evitar (separándolos de la mezcla que los contiene) materiales indeseables o tóxicos.

No sólo el costo de inversión y de mantenimiento, sino también el de operación (consumo de vapor de calefacción o de agua de enfriamiento) tiene un impacto significativo en la economía del proceso, ya que las operaciones de separación convencionales, por ejemplo la destilación, son consumidoras intensivas de energía. Resulta interesante entonces hallar métodos para minimizar los servicios auxiliares paralelamente a los costos de capital. El impacto que produce la reducción de energía es muy importante para procesos que involucran grandes volúmenes (commodities). Por ejemplo, debe tenerse en cuenta que en procesos de refinamiento de petróleo y similares, un gran porcentaje de la energía consumida se asocia con el sistema de separación.

Hay varias tecnologías para la separación de una mezcla, por ejemplo destilación, evaporación, absorción, membranas, destilación molecular, separación en un campo eléctrico, difusión térmica, cristalización, difusión por presión, extracción y muchas otras. Más aún, en la actualidad muchos de los esfuerzos de investigación se destinan a encontrar tecnologías viables que reemplacen a la destilación, la cual, si bien es una tecnología ya madura y por lo tanto confiable, consume mucha energía

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ya que desde el punto de vista termodinámico por lo general se las opera en forma poco eficiente. Es por ello también, que se destina mucho esfuerzo para lograr metodologías de síntesis para la generación de estructuras y condiciones operativas óptimas desde el punto de vista de la eficiencia energética.

El primer paso en el problema de síntesis de sistemas de separación es seleccionar el método apropiado. Aquí sólo se analizará en principio, el problema de síntesis de sistemas de destilación utilizando columnas convencionales o simples sin integración calórica.

Síntesis de trenes de destilación integrados (TDI).

En un proceso de destilación, existente o a diseñar, es posible distinguir las tareas de separación que se llevan a cabo en las columnas de destilación, de las tareas de enfriamiento y calefacción que ocurren en los intercambiadores de calor, condensadores y rehervidores, donde se generan las corrientes de reflujo y el vapor de fondo del equipo, respectivamente.

Dado un tren de destilación, cada columna debe cumplir con la tarea de separar la mezcla que ingresa a ella de forma de obtener los productos deseados con las especificaciones de pureza exigidas.

La búsqueda del sistema de destilación más económico, con integración calórica, capaz de separar una mezcla multicomponente de composición dada, implica definir:

i.- La estrategia de separación
ii.- La configuración del sistema de intercambio calórico.
iii.- Las presiones de operación de las columnas.
iv.- Los flujos calóricos involucrados en cada equipo.

La *estrategia* de separación hace referencia al orden en que la mezcla de alimentación se separa en sus componentes puros. Por ejemplo, en la Figura (II.7) se representan las cinco alternativas posibles para separar por destilación, las especies químicas A, B, C, D, de una mezcla cuaternaria (ABCD), utilizando separadores simples.

Se puede decir entonces que cada estrategia está caracterizada por una secuencia de separadores o simplemente secuencia. Puede notarse que debido a las opciones posibles, pueden hallarse un número significativo de secuencias para una mezcla de muchos componentes, y la forma de hallarlas es similar a la planteada en los ejemplos de la sección I.4. En la próxima sección trataremos este punto.

Por otra parte, la configuración del sistema de intercambio calórico asociado a un tren de destilación hace referencia a la disposición de los equipos recuperativos y auxiliares necesarios, para producir el cambio de fase buscado en cada corriente del proceso. Se denominan *equipos recuperativos*, a aquellos donde se materializa el acoplamiento calórico de una corriente *caliente* proveniente del condensador de una columna con la corriente *fría* proveniente del rehervidor de otra columna del tren.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Las características estructurales del sistema, resumidas en lo que comúnmente se denomina topología de la red, depende de la *política de acoplamiento energético* que se implemente entre las corrientes a condensar y las corrientes a vaporizar. La selección de dicha política está directamente ligada a la presión de operación adoptada en cada columna, ya que estos valores condicionan los acoplamientos inter-columnas que pueden ser implementados. Cuando se enfrenta el problema de síntesis sin considerar el sistema de intercambio, las demandas de los hervidores y condensadores son incorporadas como corrientes adicionales calientes y frías respectivamente, a la grilla de corrientes del problema de la síntesis de redes de intercambiadores, visto en el punto anterior. Esto se hace luego de haber procedido a resolver la estructura del sistema de separación, que definirá las cargas calóricas a satisfacer en cada columna (etapas jerárquicas).

Espacio de Soluciones del Problema

Aún cuando no se contemple la posibilidad de integración calórica, el problema de síntesis de la secuencia de separadores más económica es altamente combinatorio. El número de secuencias alternativas para la separación completa de una mezcla de NC componentes puede calcularse según la expresión propuesta por Thompson y King (1972):

$$\text{Número de Secuencias} = [2(NC - 1)]! \,/\, NC!(NC - 1)! \qquad (6)$$

En efecto, la separación de una mezcla de 4 componentes se lleva a cabo en 5 secuencias, para 5 componentes puede llevarse a cabo a través de 14 secuencias distintas, mientras su número se eleva a 1430 cuando NC = 9.

Como lo puntualizara A. W. Westerberg (1983), la posibilidad de integración calórica en el sistema de destilación agrava aún más el carácter combinatorio del problema de síntesis. Por ejemplo, para una mezcla de 5 componentes y suponiendo que cada columna puede acoplarse calóricamente con sólo una de las que la acompañan en una dada secuencia, el número de configuraciones posibles se eleva a 350.

El espacio de soluciones posibles es sumamente rico en diseños alternativos, los cuales involucran empalmes calóricos entre diferentes corrientes y distintas formas de interconexión de equipos para realizar en definitiva las mismas tareas, aunque a un costo total diferente. Por lo tanto, el hallazgo del sistema de destilación energéticamente más eficiente requiere de procedimientos de búsqueda que permitan barrer completamente el espectro de posibilidades.

Distintos Enfoques para abordar el Problema

En la actualidad se dispone de numerosas técnicas de diseño de trenes de destilación tanto convencionales como integrados que difieren sustancialmente en la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

estrategia de resolución del problema. De las formas alternativas que registra la literatura para resolver el problema de síntesis se pueden distinguir claramente tres enfoques, que muchas veces aparecen complementados entre sí; el heurístico, el termodinámico y el algorítmico.

Las técnicas heurísticas se caracterizan por la obtención de una estructura óptima para el sistema, apelando a determinadas reglas. Estas reglas son generalmente empíricas o bien provienen del análisis de soluciones obtenidas por otros enfoques.

Se habla de enfoques termodinámicos, cuando se aplican criterios de evaluación que se deducen a partir de conceptos derivados de la primera y segunda ley de la termodinámica. La aplicación de esos criterios permite determinar la performance del sistema real respecto a un valor teórico, límite óptimo, correspondiente al comportamiento de un sistema ideal. Los resultados obtenidos son en muchos casos de carácter cualitativo, por lo que resultan útiles para ahondar en el conocimiento físico del sistema y para restringir el espacio de búsqueda bajo otros enfoques. No obstante, para problemas de síntesis de trenes de separación (y para redes de intercambio calórico, en especial las integradas con sistemas de generación de potencia), existen algoritmos de optimización basados en funciones objetivo que contemplan aspectos de la segunda ley de la termodinámica (sistemas reversibles versus sistemas reales) que resuelven el problema muy elegantemente (ver bibliografía recomendada).

En la resolución del problema de síntesis con enfoque algorítmico, el sistema se describe mediante un modelo matemático que incluye una función objetivo, a minimizar o maximizar, y un conjunto de restricciones que definen el dominio de búsqueda de las soluciones posibles. Generalmente, la función objetivo está vinculada en forma directa con algún tipo del costo del sistema a optimizar. Normalmente, las soluciones no se obtienen en forma analítica sino numérica, mediante la implementación computacional de un algoritmo apropiado. El tiempo de computación consumido suele tomarse como medida de eficiencia del algoritmo empleado.

Una de las mayores ventajas que ofrecen los métodos algorítmicos reside en su capacidad de garantizar el carácter óptimo del diseño de un tren de destilación hallado, siempre y cuando las hipótesis del modelo matemático se satisfagan, al barrer todo el espacio de soluciones del problema y el modelo presente ciertas propiedades matemáticas especiales. Un ejemplo de la aplicación de métodos algorítmicos a la síntesis de TDI's se puede encontrar en (Benz, 1991) y (Benz y Cerdá, 1992), quienes consideraron además, la flexibilidad del sistema ante variaciones en la composición de la alimentación al tren. No obstante, este enfoque puede complicarse para el caso de sistemas que tratan mezclas altamente no ideales.

Síntesis de la secuencia de separación

Un importante problema de diseño del proceso de separación de una mezcla multicomponente es la secuencia de separación, que está relacionada con la selección

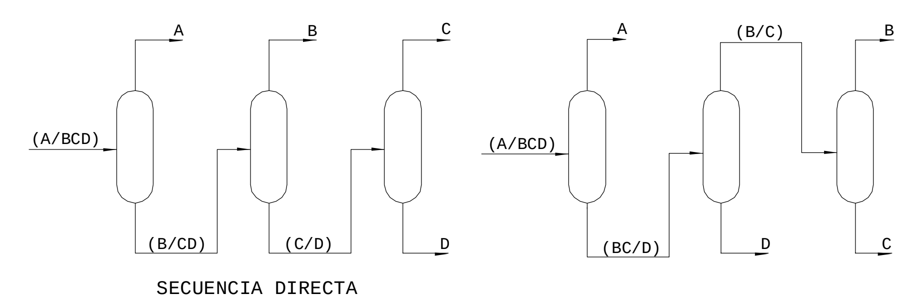
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

del mejor método y estrategia de separación para cada componente en la mezcla. Este problema se representa frecuentemente colocando en un arreglo (vector) los componentes a ser separados listados en orden de volatilidades relativas. Si se considera las secuencias para separar una mezcla de A, B, C y D, ordenados en orden descendente de volatilidades relativas (A, B, C, D), se deben examinar las diferentes alternativas. Por ejemplo (A/BCD) seguido por (B/CD) o (BC/D) y (C/D) o (B/C) respectivamente. Otra posible secuencia es (AB/CD) seguido por (A/B) y (C/D) (ver Figura (II.7)). Estas separaciones se denominan *sharp* (cada producto a ser separado aparece en una y sólo una de las corrientes de producto).

Así, como en el problema de intercambio calórico, se debe utilizar una metodología práctica para encontrar la secuencia óptima. Técnicas generales desarrolladas para resolver el problema de secuencia de separación han incluido enfoques algorítmicos, basados por ejemplo, en programación dinámica (Hendry y Hughes, 1972), métodos heurísticos (Rudd y col., 1973), estrategias evolucionarias a partir de la creación de una secuencia de separación inicial (Stephanopoulos y Westerberg, 1976), y métodos termodinámicos involucrando aplicaciones de principios termodinámicos (Gomez y Seader, 1985) entre otros.

A continuación, se ejemplificará la búsqueda de la mejor secuencia mediante un método evolucionario. Según la Figura (II.8), todas las posibles secuencias de separadores que podemos plantear para separar la mezcla en los componentes puros (también se pueden especificar separaciones prohibidas o no deseadas, o productos que comprenden mezcla de varios componentes) pueden representarse mediante un árbol. Este árbol es similar a los planteados en la sección (I.4) para el análisis de alternativas ya sea para el problema de ordenamiento de números como para la resolución analítica de una integral recurriendo al particionando del problema. En efecto, en la Figura (II.8) se observa que los nodos (mezclas producidas en los separadores) unidos con arcos representan los diversos caminos factibles (distintassecuencias de separación).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



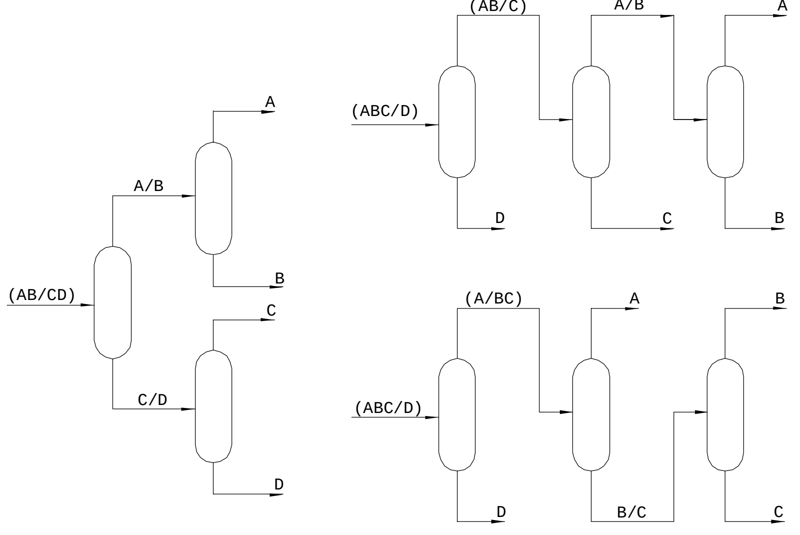


Figura II.7 : Alternativas secuenciales para separar la mezcla (ABCD) utilizando columnas de destilación convencionales. Note que el número de alternativas coinciden con el resultado de la Ecuación (II.6) para NC=4.

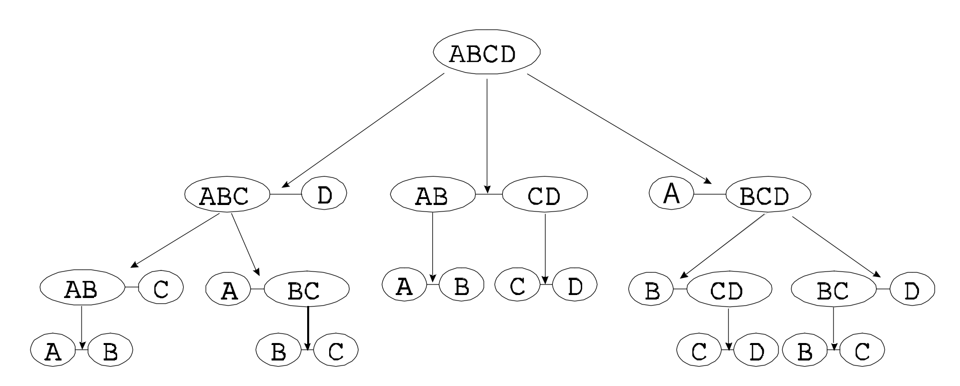


Figura II.8: Árbol de secuencias de separación para una mezcla cuaternaria.

Esto es, los nodos unidos por arcos pertenecen a la misma secuencia de separación, y deben considerarse simultáneamente para lograr la separación de la mezcla. El armado de las secuencias es muy sencillo, ya que basta con decidir en cada caso (operadores para transición entre estados) el componente a separar o el punto de corte a realizar (por ejemplo, A/B, B/C o C/D). Cada corte o separación (arco) origina subproblemas independientes (mezclas multicomponentes de menor orden), que pueden ser considerados como nuevos problemas. Para cada subproblema, una vez producida una separación, debemos continuar con el desarrollo de las mezclas remanentes, hasta lograr la separación completa (base del árbol o fin de la expansión).

Como hemos mencionado, el número de alternativas es explosivo, ya que apenas se incrementa la cantidad de componentes a tratar se generan un gran número de opciones, haciendo intratable el problema (ver Ec. 6). Por lo tanto, al igual que los problemas discutidos en I.4, deberá desarrollarse una técnica para obtener la secuencia (estructura de separación), por ejemplo, de mínimo costo total, sin necesidad de recurrir al costeo y diseño (aunque sea preliminar) de todos los separadores -lo cual es prohibitivo aún con computadores muy potentes-.

Para esto necesitamos varias herramientas. En primer lugar, algún método de costeo rápido y eficiente. Como es conocido, el diseño preliminar de una columna de destilación puede realizarse utilizando algunas aproximaciones. Las variables más importantes (habiéndose fijada la presión de operación) son el diámetro de la columna y el calor entregado al hervidor (que en una primera aproximación puede suponerse igual al extraído en el condensador). Los costos ligados a ambas variables están en contraposición, lo que exige un método de optimización para determinar el número de etapas y el reflujo de operación de la columna para lograr la separación deseada. Es usual utilizar la ecuación de Fenske para determinar el mínimo número de etapas, la de Underwood para calcular el mínimo reflujo, y la relación de Gilliland

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

para relacionar el reflujo real con el número de etapas de diseño. Generalmente, se recurre a heurísticos que aproximan el cálculo (sin plantear un problema de optimización) del número de etapas y el reflujo adoptando factores de relación adecuados (por ejemplo, multiplicar el reflujo mínimo por el factor 1,1 y adoptar el doble de las etapas mínimas). Respecto al uso de estas ecuaciones, debe aclararse que son aproximadas y pueden presentar un error considerable, aún en mezclas ideales, cuando se trata de separaciones de componentes con alta pureza o bien trazas, cuando hay una gran diferencia de volatilidades relativas o cuando la topología del separador no se encuadra con las hipótesis del desarrollo de las mismas. Además, para mezclas no ideales son decididamente inadecuadas. Para el caso de número mínimo de etapas por ejemplo, si las volatilidades relativas varían mucho a lo largo de la columna puede utilizarse la ecuación de Winn, que contempla factores de corrección de las volatilidades relativas por presión y temperatura dentro del rango de interés. Cuando la mezcla es no ideal, esta solución tampoco es adecuada, y deben utilizarse métodos rigurosos de cálculo.

Dentro de este contexto, aún cuando para mezclas ideales puedan utilizarse las ecuaciones anteriores, suponiendo que en realidad en esta etapa del diseño lo que se hace es una comparación relativa -entre alternativas competidoras- y no cálculos absolutos, se debe todavía solucionar el problema de explorar el enorme número de alternativas posibles. Para esto podemos proceder según dos estrategias. Una es puramente empírica o heurística, mientras la otra es algorítmica, en el sentido que recorre las alternativas evaluando costos según una estrategia sistemática especificada (algoritmo).

En el primer caso se parte de plantear reglas del arte, o heurísticos, que si bien no aseguran el óptimo, garantizarían una secuencia al menos sub-óptima, esto es, en el entorno del óptimo. Los heurísticos propuestos (ver por ejemplo Seader and Westerberg, 1977) en general tienen alguna explicación teórica, pero mayoritariamente están basados en relaciones aproximadas como las ecuaciones anteriormente mencionadas, o hipótesis equivalentes. Otros surgen de la experiencia ante un gran número de casos analizados. Por ejemplo, se pueden plantear los siguientes heurísticos o reglas para generar las secuencias:

i.- Si la mezcla tiene composiciones y volatilidades relativas similares, entonces favorezca la secuencia directa. Esto implica, dado que están ordenadas por volatilidades relativas decrecientes, que se elimine por tope de cada separador el componente más volátil.

ii.- Si los componentes de la mezcla se caracterizan por una marcada diferencia entre las volatilidades relativas, entonces separe el más volátil primero.

iii.- Si las composiciones (fracciones) molares en la mezcla son muy disímiles, pero no las volatilidades relativas, entonces separe los componentes de tal forma de eliminarlos en orden decreciente de fracciones molares.

iv.- Si para separar un componente debe recurrirse a un solvente auxiliar,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

remueva este inmediatamente en la secuencia.

Estas reglas se utilizan durante la expansión del árbol (Figura II.8), ya que ante cada alternativa permiten seguir un camino en detrimento de los otros, limitando la enorme cantidad de opciones existentes. Se propusieron numerosos heurísticos, y muchas veces contradictorios entre sí, en cuanto a las acciones a realizar y en el orden en que se toman. No obstante, en general puede afirmarse que las soluciones halladas, o bien constituyen una solución sub-óptima, a un costo de cómputo muy razonable, o bien constituyen un buen punto de partida para un método algorítmico, a los efectos de ahorrar esfuerzos de cálculo en éstos.

En efecto, como habíamos comentado en el problema de ordenamiento de números en un arreglo matricial (sección I.4), para aplicar un criterio o función de evaluación necesitamos, en general, conocer algo acerca de la solución deseada. Por ejemplo, si la función evaluación involucra la distancia a la solución, necesariamente su cálculo implica conocer ésta última. Aquí es trivial el hecho de que la solución involucra todos los componentes separados, si esa es la especificación de diseño. El problema es que necesitamos hallar la secuencia de costo mínimo, y ésta no la conocemos de antemano, por lo que no podemos comparar ninguna solución actual en relación con la solución deseada, porque sencillamente la desconocemos. Por otra parte, queremos hallarla sin generar todas las alternativas.

Una solución es considerar como una aproximación al costo de la secuencia óptima (esto es calcular mediante las ecuaciones anteriormente vistas los costos de cada separador y sumarlos) el costo de la secuencia generada por medio de la síntesis heurística, ya que se logra fácilmente. A partir de allí, teniendo una cota deseable o punto de referencia, podemos evolucionar (estrategias evolucionarias) hacia una solución de menor costo, perturbando con cierta estrategia las opciones de corte en cada separador de la secuencia y observando cómo se comporta el costo de las alternativas generadas (Stephanopoulos y Westerberg, 1976).

Debido a que ni las estrategias heurísticas ni las evolucionarias pueden asegurar el óptimo, es conveniente, luego de un estudio o etapa preliminar, utilizar un algoritmo que contemple el barrido de las secuencias, aplicando una función de evaluación adecuada para minimizar el número de nodos visitados. Además, deberá contemplarse en el costo la mayor cantidad de variables posibles, como ser por ejemplo la optimización del plato de alimentación, etc. Nuevamente, necesitamos un punto de partida para evaluar cada secuencia en el proceso de expansión. Una estrategia puede ser una secuencia generada por los métodos anteriores, otra puede ser tomar un heurístico que haga que se expanda siempre a través del separador de mínimo costo, al analizar cada nodo. Luego de generada esta primer secuencia, se suman los costos de cada una de sus unidades y esta será la de costo mínimo o de referencia (Thompson and King, 1972). Al tomar como costo cota el valor dado (cota de máxima al mínimo costo) retrocedemos hacia arriba en el árbol para tomar, ante el primer nodo *or*, las nuevas direcciones de expansión. Se evalúa para cada secuencia

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

generada el costo, y se lo compara con la cota. Si aparece un costo menor, se reemplaza la cota por el valor nuevo, y la secuencia, por la nueva secuencia encontrada. De esta manera, se sube un nivel en el árbol y se sigue con el mismo procedimiento. Cuando no existan más nodos por expandir, la secuencia resultante y el costo de la misma representa la solución. A diferencia de los métodos anteriores, y si bien debe tomarse esto relativo a las hipótesis asumidas, esta forma de proceder garantiza un óptimo. Queda claro también que cuanto mejor sea el heurístico empleado para generar la primer secuencia (o valor base o cota para el costo mínimo), menos tiempo de cómputo se empleará ya que no será muy fácil encontrar valores menores de costo, y nuevas secuencias alternativas. Esto es, en las ramas no óptimas, unos pocos cálculos implicarán un costo mayor al óptimo y por lo tanto se reducirá la exploración de cada rama.

Existen inconvenientes, según comentamos, cuando pretendemos aplicar estas metodologías a mezclas azeotrópicas o destilación extractiva, en las cuales se recurre a diversos agentes o solventes auxiliares que complican la generación o expansión de árbol, así como también la aplicación de las fórmulas aproximadas para el cálculo del costo. Para este tipo de problemas es posible utilizar otros métodos, también algorítmicos, pero basados en propiedades termodinámicas de la mezcla, y el concepto de destilación reversible (ver por ejemplo Petlyuk y col., 1965; Aguirre y col.,1992; Koehler y col., 1992; etc.).

Resumen

En síntesis, en los puntos anteriores se analizaron algunos tópicos del problema de síntesis de procesos. Como fuera mencionado en la sección II.3, la síntesis de un proceso completo es demasiado complicada y hasta el presente sólo se ha podido lograr una solución sub-óptima (estrategia de descomposición). Esta área es materia de varios esfuerzos de investigación para mejorar el conocimiento y obtener mejores procedimientos para el diseño de procesos óptimos.

Bajo este contexto, se lograron resultados en subproblemas específicos como la síntesis de redes de intercambio calórico, sistemas integrados de calor y potencia, síntesis de sistemas de control, sistemas de separación, sistemas de reacción, etc. Además, obviamente el combustible quemado es proporcional al consumo de calefacción en el proceso, por lo que al minimizar los servicios también se minimiza las emisiones gaseosas por combustión (Linnhoff, 1994), minimizando el impacto sobre el ambiente.

En este capítulo solo se mencionaron unos pocos métodos propuestos para la síntesis de subunidades como la red de intercambiadores y las secuencias de columnas de destiladores simples para el problema de la separación de una mezcla de NC componentes bajo ciertas condiciones. No obstante, existen muchos otros algoritmos que el lector puede encontrar en la bibliografía especializada. El objetivo de esta breve introducción en nuestro caso es mostrar que existe una metodología sistemática para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

enfrentar la tarea de diseño de un proceso, y además, que dado nuestro estado de conocimientos, el procedimiento es iterativo, exigiendo interacción entre las herramientas informáticas propuestas para realizar cada tarea o etapa.

Finalmente, es importante remarcar que en la última década se desarrollaron numerosas aplicaciones computacionales (muchas de ellas software comercial) que son útiles para la resolución de diferentes problemas de síntesis. Más aún, la tendencia muestra que en un futuro cercano muchos algoritmos de síntesis de sub-unidades serán reunidos en ambientes de diseño integrados, logrando otra etapa hacia el paradigma final en la disciplina o metodología CAD *(Computer Aided Design* o diseño asistido por computadora).

II.4 EJEMPLO: BREVE NOCIÓN DE TÉCNICAS DE SÍNTESIS APLICADAS A UN PROCESO DE DESALACIÓN DE AGUAS DE MAR.

Los procesos de desalinización de agua de mar o salobres de otra procedencia tienen como objetivo convertirlas en agua potable para consumo humano y/o animal.

A principios del siglo XX la revolución industrial se consolida y el vertiginoso crecimiento de la población aumenta desde 1600 millones de habitantes a aproximadamente 7000 millones en nuestros días. Dentro de este contexto, decenio a decenio, el margen entre recursos hídricos y demanda se reduce peligrosamente, principalmente en aquellos países en los cuales existe un considerable grado de desarrollo, ya que la expansión demográfica, agrícola e industrial juegan un rol preponderante. Por otra parte, la contaminación de numerosas fuentes de aprovisionamiento de agua dulce y la irracional administración de las reservas naturales contribuyen a acrecentar la problemática. Como consecuencia de varios estudios, puede concluirse que uno de los problemas ambientales más importantes para la humanidad, en el futuro inmediato, es afrontar la dramática carencia de recursos de agua potable. Ante semejante perspectiva, se recurre a la investigación permanente a los efectos de lograr tecnologías eficientes para la elaboración de agua potable, de tal forma de expandir las reservas hídricas disponibles a un costo accesible para poder masificar el consumo.

A tales efectos, la desalación de aguas salobres resulta sumamente importante, ya que, por ejemplo, el agua disponible en el mar resulta un recurso prácticamente ilimitado. Obviamente, el problema básico consiste en separar las sales disueltas en el agua, de tal manera de lograr un nivel de soluto acorde con el mínimo aceptable para el consumo humano y/o necesidades prácticas en la industria.

En general, los principales métodos de desalación pueden agruparse según la siguiente clasificación: por métodos térmicos, electrodiálisis, intercambio iónico, ósmosis inversa, formación de hidratos, etc. Esta descripción no pretende ser exhaustiva, sólo se mencionan las principales áreas o principios en los cuales se basan los procesos que han logrado utilización a escala industrial.

Si bien aquí pretendemos ejemplificar el proceso de generación de las diversas opciones posibles para lograr un producto dado y por lo tanto deberían explorarse todas las alternativas, en adelante, para simplificar el análisis de la síntesis de la estructura óptima, sólo analizaremos brevemente el campo de los procesos de desalación por métodos de evaporación.

En la práctica, se utilizan con éxito diversas tecnologías que se basan en la evaporación. Así también, existen procesos que se basan en la mayoría de los principios antes citados. Su conveniencia depende de muchos factores, entre ellos del costo relativo entre la energía eléctrica, el precio del petróleo o gas, elementos de análisis estratégicos, la tasa de interés, el costo de los materiales, etc. Sin embargo, es posible imaginar también un problema en el cual sólo se poseen estudios de laboratorio, que proveen detalles conceptuales acerca de los diversos principios para la desalación. No obstante, debe plantearse la obtención de un proceso industrial óptimo, sin disponer de plantas industriales en funcionamiento como ejemplos.

Los procesos de desalación basados en operaciones de evaporación son los históricamente más desarrollados y presentan, a la fecha, diversas alternativas. Fundamentalmente se basan en la separación del agua de la salmuera por evaporación, tratando de utilizar el calor de condensación del vapor producido (ya que el producto es líquido) para precalentar la alimentación o para obtener una nueva cantidad de vapor. En la Figura (II.9) se presenta un esquema global del proceso, donde se muestra el bloque genérico de separación por evaporación y el bloque de recuperación de energía (el producto deseado es líquido, por lo cual puede recuperarse el calor latente de condensación). Este calor puede utilizarse para precalentar la alimentación o para producir más vapor (separación). En el esquema se prevé la incorporación de energía al sistema, a través del bloque de calentamiento en el cual se aporta energía externa. Como se verá luego, según los distintos casos, ésta podría ser calórica o mecánica.

Como antes mencionamos, al enfrentar un proceso como el descripto, lo conveniente es dividirlo en subproblemas. También vimos que no existe un único criterio para ello. Por ejemplo, aquí tenemos simultáneamente una operación de transferencia de calor y de separación (bloques), lo cual hace difícil plantear cada problema por separado. Esta necesidad de individualizar cada subsistema y sus articulaciones para lograr un resultado final es una parte muy importante del planteo del problema de síntesis. Como veremos más adelante, para este ejemplo, es posible lograr un planteo del problema que recoge elementos de la síntesis de redes de intercambio calórico como una aproximación al proceso global, bajo ciertas hipótesis.

En lo que sigue, trataremos de analizar muy someramente, utilizando los principios elementales explicados anteriormente sobre la síntesis de redes de intercambio calórico y las nociones sobre sistemas integrados de generación y potencia, algunas de las alternativas que funcionan con éxito en la industria de la desalación de aguas, a los efectos de ejemplificar en un caso real, los elementos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

discutidos más arriba.

Además, resultará interesante, durante el ejemplo, remarcar las etapas en las cuales, por cada alternativa propuesta, resultaría conveniente o necesario analizar la performance, contemplando rigurosamente los aspectos de diseño tales como el sistema de control, operabilidad, análisis de fallas, etc., o lo que es lo mismo, la utilización de simuladores tanto estacionarios como dinámicos. Aquí resultará mucho más evidente lo remarcado anteriormente, respecto al grado de flexibilidad que deben poseer los simuladores de uso general, ya que durante la tarea de diseño deberán ser utilizados numerosas veces, y siempre sobre variantes estructurales u operativas que surgen de aplicar criterios de optimización evolutivos durante el ciclo de diseño.

Síntesis de la estructura de los procesos de desalación por vía térmica

Como hemos mencionado, los procesos de desalación por evaporación separan el destilado de la salmuera a través de un cambio de fase. Debido a que el sistema desalador produce agua a partir de evaporaciones y posteriores condensaciones (el producto es líquido), se pueden identificar numerosas operaciones de intercambio calórico, que además incluyen el pre-calentamiento de la alimentación.

Luego, existirá un sistema de recuperación de energía asociado al complejo desalador (red de intercambio calórico). Es de notar que, por lo general, los problemas clásicos que se presentan en la síntesis de una red de intercambio (por ejemplo en una refinería de petróleo) se caracterizan por la presencia de un gran número de corrientes, y un número importante de equipos tanto de transferencia de materia como de energía.

Como hemos visto en la sección 3.1 el problema resulta bien planteado si se conocen todas las corrientes, las temperaturas de entrada y salida, sus propiedades fisicoquímicas, etc.

En nuestro ejemplo, en cambio, si bien existe una red de intercambio calórico según se muestra en la Figura (II.10), esta no está definida en cuanto al número de corrientes y sus temperaturas, tanto de entradas como de salidas. Por lo tanto, estrictamente hablando, o conceptualmente hablando, el ejemplo analizado no es un problema típico de síntesis de redes de intercambio calórico. Además, el enfriamiento de la corriente caliente (T_e a T_s) se produce por evaporación flash, simultáneamente con la producción de vapor, que se utiliza para intercambiar calor con la corriente fría. No obstante, pueden aplicarse todos los principios conceptuales discutidos anteriormente, a partir de un razonamiento muy sencillo.

A continuación expondremos la relación que nos permitirá asociar el proceso de transferencia de energía y vapor simultáneos con la estrategia de modelado que hemos introducido para la síntesis de la red de intercambiadores, esto es la representación en el diagrama T-H.

Sea por ejemplo una corriente fría (CF) que evoluciona tomando calor de una corriente caliente (CC) en un dispositivo en contracorriente como se indica en la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

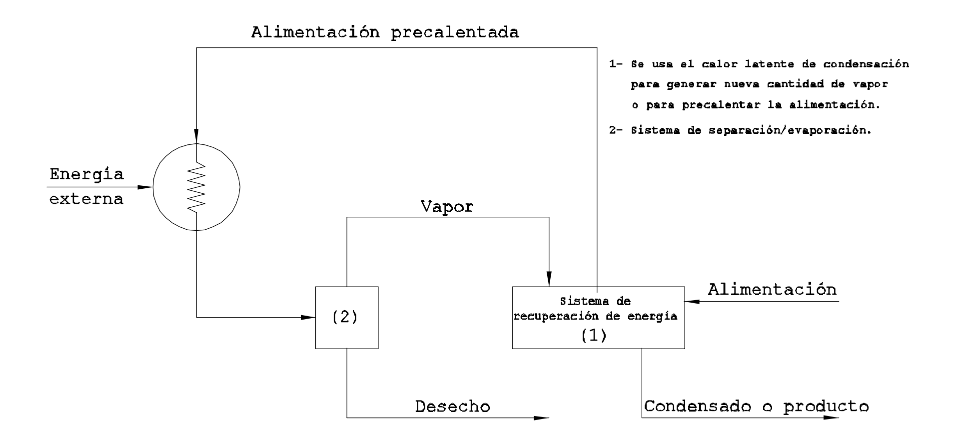


Figura II.9: Esquema estructural de un sistema de desalación por evaporación.

Figura (II.11), ambas con el mismo flujo de capacidad calorífica. A diferencia de los sistemas de intercambio convencionales, en este caso, podemos suponer en un principio que el enfriamiento (dT) de la SCC se produce como consecuencia de un enfriamiento brusco o auto-evaporación diferencial (o flasheo) en el diferencial de longitud (dL). La corriente de vapor generada (dV) será la encargada de transferir calor a la CF, al condensar y ceder energía térmica (dQint), provocando en ella un aumento diferencial de temperatura (dt), que por un simple balance de energía resulta igual a la caída (dT) experimentada por la CC.

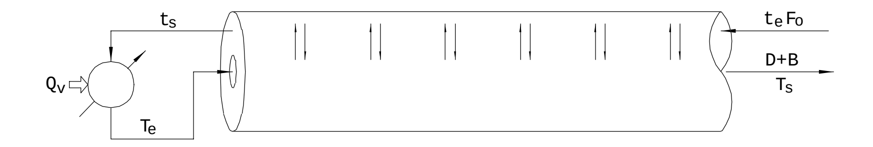
El vapor condensado (dV), genera una corriente líquida (dD), apareciendo por lo tanto una nueva corriente cuya evolución debe ser equivalente a la CC que la origina; dado que el destilado objeto del proceso debe ser obtenido a temperatura ambiente (To) y debe enfriarse. Por lo tanto, si bien ambas corrientes físicamente resultan diferentes, a los efectos del modelo, destilado y salmuera conforman, por definición, la supercorriente caliente (SCC) con un flujo de capacidad calorífica constante, independientemente que a medida que evoluciona a lo largo de la longitud (L) se produce su separación en la corriente de destilado (D) y la de deshecho (B).

En otras palabras, tenemos la supercorriente fría (salmuera que se precalienta) y la supercorriente caliente, conformada por la salmuera que se enfría (por evaporación súbita), y el destilado que circula por las etapas (que también se enfría por evaporación) hasta convertirse en el producto final.

Se supone además, que existe la fuerza impulsora necesaria para la evaporación flash, esto es, un gradiente de presiones (dP) a lo largo del dispositivo de intercambio, de tal forma de permitir el *flasheo* de la SCC y originar la corriente de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

vapor (dV). En la Figura (II.10) se muestra un esquema idealizado que cumple con las premisas consideradas en el dispositivo anteriormente analizado, siendo necesaria la presencia del calentador de salmuera para llevar la temperatura de la CF desde t_s a T_e,
necesariamente mayor a los efectos de permitir la condensación de la corriente dV producida por auto-evaporación de la SCC.



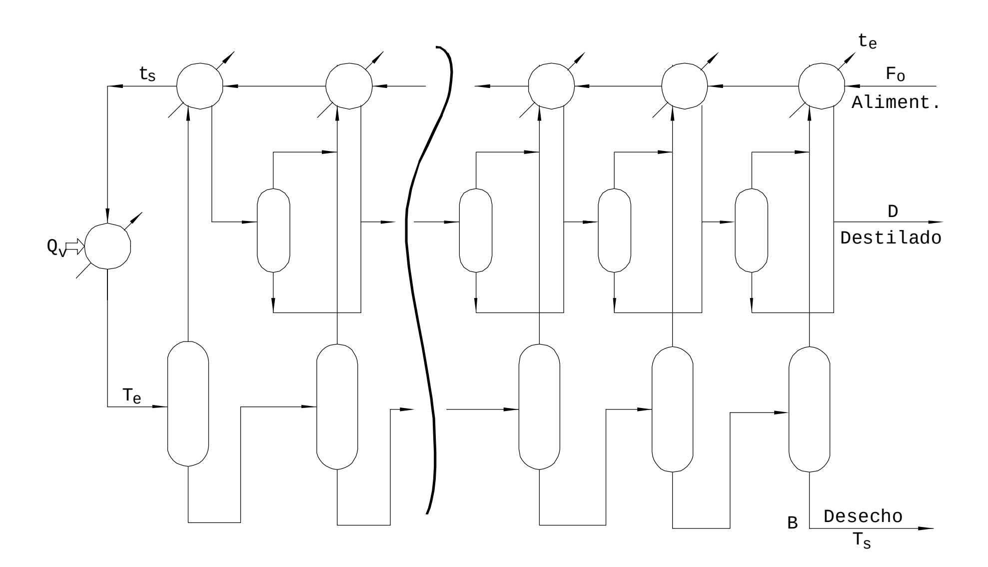


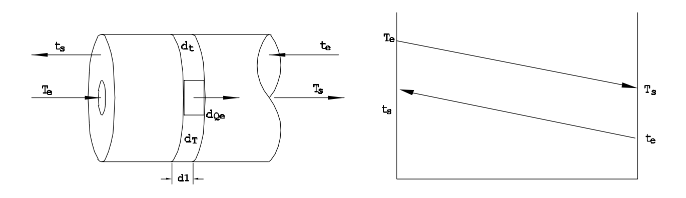
Figura II.10 : Estructura del sistema con infinitas etapas, derivada del modelo adoptado para el intercambio calórico, con evaporaciones diferenciales tanto de la corriente de destilado como de la salmuera de desecho.

Esta evolución analizada para la SCC, coincide con una evolución en la cual

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

se cede energía calórica en forma de calor sensible, de tal forma que su representación en el plano (T-H) será una línea recta, paralela a la que representa la evolución de la CF (ya que son la misma supercorriente antes y después del calentador introducido en el esquema de la Figura (II.10)). Se nota por lo tanto que, en virtud de la estrategia de modelado adoptada, pese a producirse una transferencia simultánea de materia (vapor) y energía entre ambas supercorrientes, el enfoque en el diagrama T-H convencional para representar la evolución del sistema de intercambio se aplica directamente (Figura II.11).

Como analizáramos en la Sección 3.1, aquí tenemos un sistema sencillo desde el punto de vista del diagrama T-H. En efecto, en la Figura (II.12) se observa en la parte (a) la situación de máximo consumo de servicios, disminuyendo éstos a medida que se desplacen las supercorrientes, de tal forma de producir superposición, o lo que es equivalente, la factibilidad de intercambio entre las mismas. Esta superposición está limitada como vimos por el valor de acercamiento mínimo permitido (Δt), ya que si se adopta $\Delta t = 0$, la recuperación de energía térmica será máxima, pero el área de intercambio térmico resulta infinita. Por otra parte, la SCC debe siempre poseer una temperatura mayor a la SCF ($\Delta t > 0$).



Intercambio elemental entre la supercorriente fría y caliente.

Figura II.11

Queda claro según lo expuesto que una evolución como la indicada en la Figura (II.12) puede ahora representar una operación de intercambio calórico convencional, o bien para este caso, una en la cual se realiza un transporte simultáneo de vapor y energía calórica, según el mecanismo analizado recientemente. Resulta sumamente importante además, una consecuencia directa de tal correspondencia. En efecto, existirá una relación que vincula la cantidad de energía recuperada (Qint) y el destilado producido (D); ya que éste último es proporcional a aquél, según se desprende a partir de la evolución de la SCC, en la cual todo el calor transferido se realiza a partir de la producción de vapor. Esta relación puede obtenerse analizando

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la producción elemental (en cada etapa) de las sucesivas evoluciones diferenciales de *flasheo* de la SCC. Sin embargo, no nos abocaremos aquí a esta tarea, dejando al lector con inquietudes consultar a la bibliografía citada (Scenna, 1987).

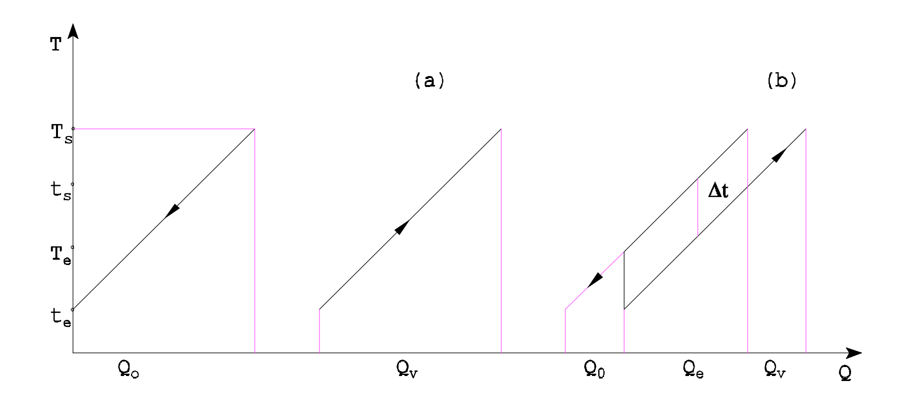


Figura II.12: Evolución de ambas supercorrientes en el diagrama T-H.
(a) Solapamiento nulo (máximo consumo)
(b) Solapamiento máximo (mínimo consumo)

Dispositivo real.

Una vez adoptado el parámetro Δt, según lo visto, la evolución anterior determina el mínimo consumo energético (Q_v) ya que al asegurarse la máxima superposición (Intercambio calórico entre las supercorrientes) se maximiza la recuperación de calor (Q_e) a partir de las corrientes calientes. Por otra parte, debido a que el calor recuperado, en función del mecanismo utilizado, está acompañado de una transferencia de vapor a partir de la salmuera, se incrementa la producción de destilado. No obstante, el sistema definido por esta evolución idealizada contiene infinitas etapas de flasheo, cada una con *un salto diferencial de presiones (o temperaturas)* y una producción diferencial.

Evidentemente, un sistema real, será aquél que contenga un número finito de etapas de flasheo (ver Figura (II.13)). En consecuencia, si se desea analizar la evolución correspondiente a un sistema real, entendiendo por tal uno con un número de etapas finito, se deberán introducir saltos finitos de temperaturas para el *flasheo* (Δt_f) en lugar de los saltos diferenciales previamente considerados en el enfriamiento de la SCC. Obviamente, y en correspondencia con éste, queda definido un salto de presiones equivalente (Δp_f). Por otra parte, es evidente que el valor (Δt_f) no puede ser arbitrario. En efecto, su cota superior resulta el valor (Δt) definido para la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

operación de intercambio calórico. Por otra parte, para condensar los vapores producidos con área finita será necesario disponer de un acercamiento de temperaturas (Δt_c). Nuevamente, el valor correspondiente a dicha magnitud resulta acotado. Más aún, según la Figura (II.13), resulta sencillo plantear la relación que vincula los saltos térmicos mencionados. En efecto, la modificación introducida involucra el desdoblamiento de la fuerza impulsora para la transferencia calórica original (Δt) en dos componentes; el equivalente térmico correspondiente al gradiente de presiones ($\Delta t_f \sim \Delta P_f$, fuerza impulsora para la transferencia de materia), y el acercamiento permitido para la condensación de los vapores Δt_c , fuerza impulsora para la transferencia de calor).

En la Figura (II.14) se gráfica en el plano T-H, la evolución que corresponde a un sistema cuyas temperaturas extremas son T_m y T_o respectivamente, evolución en la que se basa la alternativa tecnológica conocida como proceso de desalación por flash múltiple etapa (EMF) sin recirculación, en la cual se ha supuesto un valor constante para (Δt_c) y (Δt_f) en cada etapa.

A poco de observar el diagrama indicado en la Figura (II.14) nos damos cuenta que existirán diversas políticas de asignación de caídas de presión (temperatura) entre etapas (todas iguales o distintas entre sí), lo cual producirá simultáneamente distintas fuerzas impulsoras (diferencias de temperaturas) en los intercambiadores de pre-calentamiento de la alimentación. Luego, existirá una política óptima de asignación de las mismas que produzca un costo mínimo. Dicha política puede obtenerse, planteando un problema de optimización (con los métodos que se analizarán en el Capítulo XII) o bien obtener una solución aproximada construyendo un diagrama equivalente a la Figura (II.6). En efecto, el costo del sistema no sólo involucra el área de intercambio y el vapor de calefacción, ya que existe un costo asociado a cada *recipiente* de vaporización, siendo este factor proporcional al número de etapas. Además existe un costo asociado al bombeo de fluidos, el pre-tratamiento de la alimentación, etc. No obstante, para un diseño preliminar, puede suponerse con un gran margen de seguridad, que el costo determinante está asociado al sistema de intercambio calórico, por lo cual optimizarlo implica optimizar el proceso.

Aquí sólo nos resta destacar que a partir de un razonamiento elemental, y apoyados en prácticas o principios de la síntesis de redes de intercambiadores, se pudo *generar* una estructura para el sistema, y además, visualizar rápidamente las variables que pueden afectar la *performance* óptima del proceso. En este caso, las más importantes son obviamente el número de etapas y el acercamiento mínimo permitido en los intercambiadores, tanto principal como los de recuperación de calor. Esto implica dos variables, cuando se supone que todos los saltos entre etapas son iguales; mientras que si se considera que los saltos en cada etapa pueden ser diferentes entre sí, el número de variables a optimizar se incrementa notablemente. Si se considera que el coeficiente global de intercambio (U) también varia etapa a etapa, la complejidad del problema se incrementa aún más.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

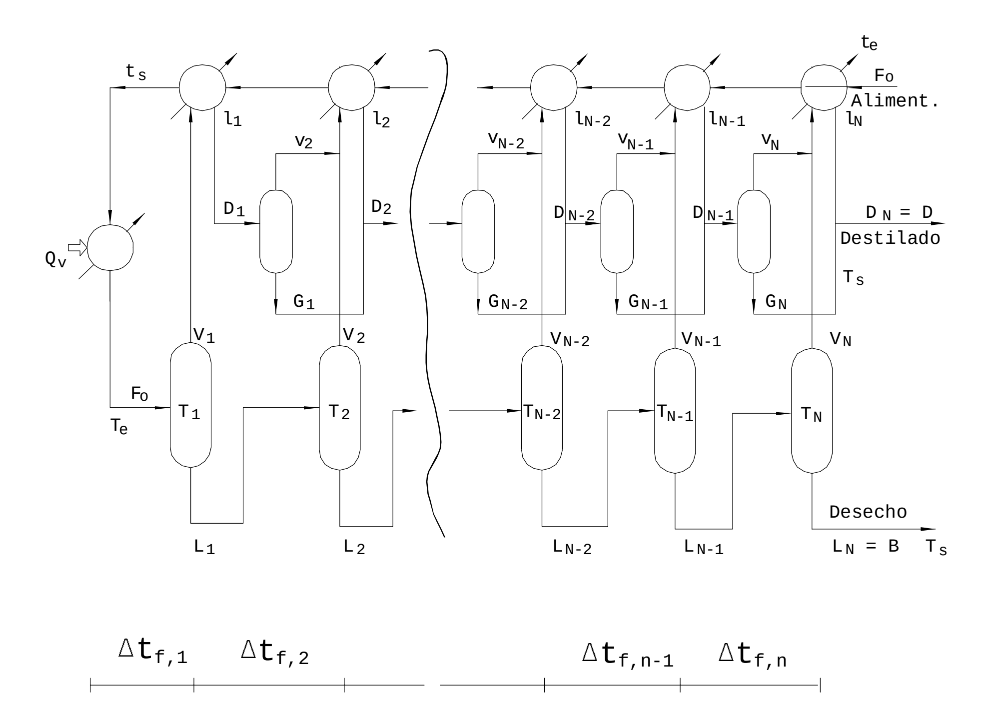


Figura II.13: Esquema de un dispositivo real y principales variables asociadas al sistema Evaporación Múltiple Flash (EMF).

Obviamente, si se requiere analizar la *performance* operativa del proceso, deberán introducirse las propiedades de los fluídos, por lo que será necesario recurrir a un modelo más riguroso, ya sea para la simulación estacionaria o dinámica, o bien para el diseño geométrico de las cámaras de *flasheo*, o del sistema de vacío. En efecto, la elevación del punto de ebullición depende de la temperatura, la cantidad de vapor producida depende de la eficiencia de la operación de *flasheo* (que dependerá de la geometría de la cámara), la potencia del sistema de vacío dependerá de los no-condensables. En general, se recicla parte de la corriente de desecho ya que está tratada y puede entonces ahorrarse el costo de pre-tratamiento de la porción reciclada, etc. Por otra parte, los coeficientes peliculares de intercambio dependerán de las propiedades de los fluidos en cada cámara y su geometría, y no son constantes. En síntesis, luego del análisis genérico de las estructuras, o bien una optimización de

variables operativas, que por lo general para simplificar el problema en una primera etapa involucra un modelo simplificado, cuando queremos analizar la *performance* del proceso, o su operabilidad bajo determinadas condiciones, debemos recurrir a un simulador riguroso ya sea estacionario o bien dinámico (ver Capítulo XVII).

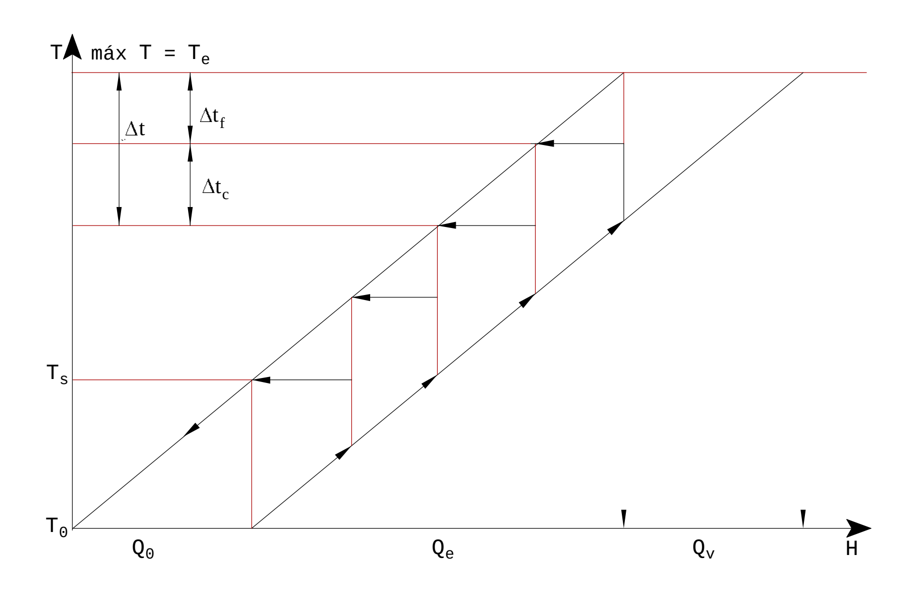


Figura II.14: Evolución de un sistema EMF en el diagrama T-H.

El proceso aquí bosquejado, (solo se han indicado nociones elementales), es muy empleado hoy en día, y se lo conoce como Evaporación Múltiple Flash (EMF).

Un análisis similar puede realizarse para un sistema por evaporación múltiple efecto (Scenna, 1987). Más aún, las estructuras óptimas para un sistema por evaporación múltiple efecto implican un procedimiento bastante complejo, involucrando enfoques similares a los aquí bosquejados o métodos de optimización computacionales (Schenoy, 1995).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

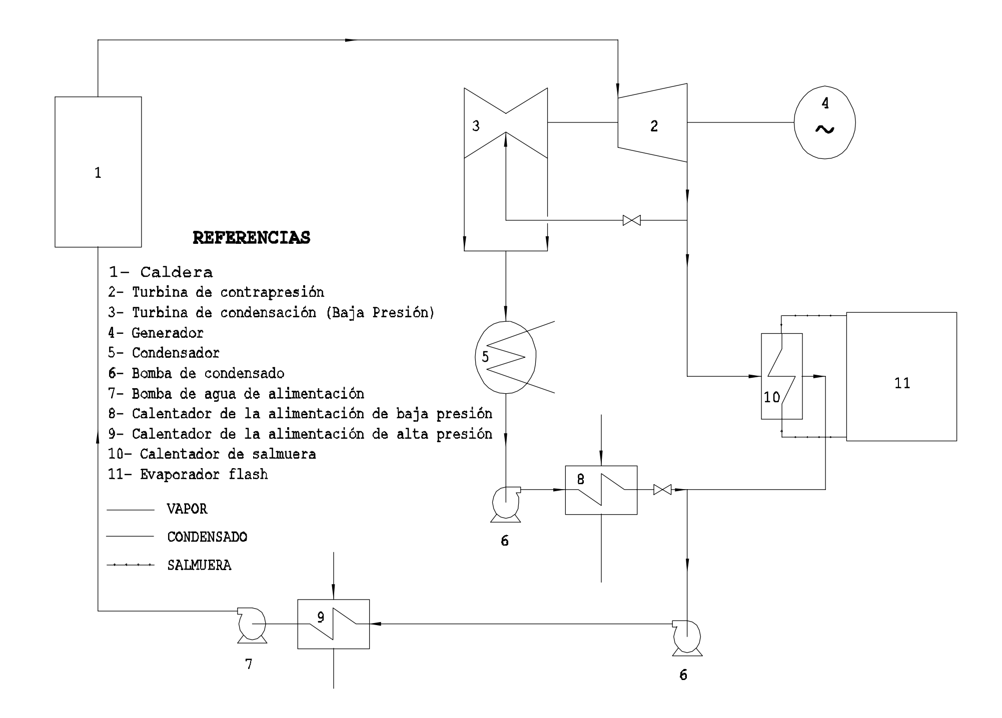


Figura II.15: Esquema de una planta de doble propósito con turbinas de contrapresión y de condensación

Síntesis de sistemas de desalación con doble propósito

Como hemos comentado en la sección 4.2, analizando el esquema de intercambio entre las corrientes frías y calientes en el diagrama T-H se pueden extraer conclusiones útiles acerca de la integración del sistema con máquinas térmicas, tanto aquellas para la producción de potencia como para las que la consumen. En el caso de los procesos de desalación, la producción de agua potable por métodos evaporativos requiere del aporte de energía calórica a los niveles de temperatura que surgen del diseño de estos procesos. En otras palabras, se podría pensar en que la demanda de energía del sistema de desalación sea provista por la descarga de un ciclo de generación de potencia.

Se puede probar, por las reglas de integración de máquinas térmicas a la red de intercambio, que una integración como la indicada en la Figura (II.15) resulta adecuada, ya que la descarga de la máquina térmica se aprovecha íntegramente en calentamiento (el calentador principal del desalador), por lo que tiene eficiencia marginal del 100% (todo el calor adicional al que se entrega al desalador y pasa por

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el ciclo se convierte íntegramente en trabajo). Esto es, en el sistema integrado se logra *convertir* esa cantidad de calor totalmente en trabajo, lo cual está prohibido por la segunda ley de la termodinámica, si utilizáramos el ciclo funcionando solamente, en forma no integrada.

Aquí pueden plantearse varios esquemas de integración, esto es, turbinas de contrapresión (descargan todo el vapor luego de la expansión al calentador principal del desalador), de extracción (sólo se extrae lo necesario para la demanda en el desalador pero el resto del vapor prosigue la expansión hasta el máximo posible), y por último, la utilización de turbinas de gas, las cuales generan una corriente gaseosa a alta temperatura que puede utilizarse para generar vapor y éste, luego de pasar por una turbina de alguno de los dos tipos mencionados arriba, podrá ser utilizado en el calentador principal del desalador (Aguirre y col., 1997), (Scenna, 1987).

En resumen, es posible, desde el punto de vista estructural, plantear la integración del proceso a un sistema de generación de potencia ya que además las poblaciones demandan simultáneamente ambos productos. En este sentido, la mejora se manifiesta con la cristalización de procesos híbridos que aprovechan características ventajosas de las metodologías básicas ya descritas.

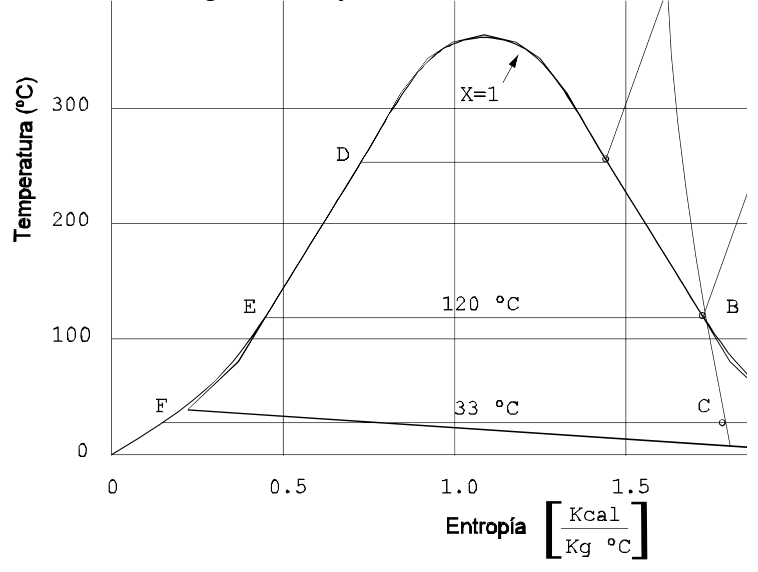


Figura II.16: Evolución característica del vapor en plantas de desalación por doble propósito. El punto B muestra el nivel de expansión cuando se extrae vapor para utilizarlo en el evaporador flash. El punto C muestra la expansión de una turbina de condensación. La diferencia implica potencia eléctrica no producida a cambio de eliminar servicios de calefacción en el calentador.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En la Figura (II.16) se representa en un diagrama T-S, la evolución característica del vapor en plantas de desalación por doble propósito.

No obstante, además de generar las estructuras y alternativas, debemos optar por una de ellas, según un criterio de óptimo. Nuevamente, esto dependerá de muchas variables, tanto del desalador (ya hemos mencionado varias) como de los ciclos de potencia posibles de integrar. Por ejemplo, deberá analizarse la proporción entre agua y energía demandada (lo cual puede favorecer a uno u otro tipo de turbinas en la alternativa de integración), el precio de la electricidad, el del agua, la tasa de interés, el precio del combustible, etc.

Nuevamente, se deberá plantear un modelo de optimización en el cual intervengan todas las variables. Además, para verificar la performance del sistema involucrando aspectos tanto estáticos como dinámicos cada vez más profundos (geometría de las cámaras, nivel de las mismas, etc.) a los efectos de estudiar criterios de control ante fuertes fluctuaciones de la demanda (ciclos diurnos, estacionales, etc., tanto en agua como en electricidad), deberá necesariamente utilizarse un simulador riguroso que involucre todos los equipos mencionados, contemplándose sus características geométricas y operativas.

Consideraciones Finales acerca del Ejemplo

Existen además otras combinaciones posibles. En efecto, así como se plantean reglas para la integración adecuada de ciclos productores de potencia también existen las correspondientes para la ubicación de los ciclos consumidores de potencia. Para nuestro ejemplo, sólo mencionaremos que éstas justifican a los sistemas de compresión de vapor, en los cuales se reemplaza la fuente de energía externa (vapor de calefacción por energía mecánica), recurriendo a compresores. La utilidad práctica de esta opción nuevamente dependerá de los costos relativos asociados, la operabilidad del sistema, etc., exigiendo un estudio en profundidad, al igual que las anteriores propuestas.

Podría también suponerse, en la alternativa de bombeo de calor por medios mecánicos, la utilización de vapor como elemento de arrastre y proveedor de la energía necesaria, a través de un eyector. Esta alternativa, en la cual se utilizan eyectores para la compresión de vapores en lugar de energía mecánica, se conoce en la actualidad como procesos de desalación por termo-compresión.

Por otra parte, dado que el vapor necesario para que funcione un eyector puede disponerse a partir de extracciones a una turbina, como en el caso de las plantas doble propósito, pueden plantearse de este modo nuevas alternativas. Igualmente, puede considerarse la combinación de elementos estructurales basados en termo-compresión, energía mecánica, y evaporación múltiple flash o múltiple efecto. Es decir, combinaciones híbridas que serán más convenientes o no, de acuerdo a un número de condiciones que deberán analizarse en cada caso particular. Y para ello,

seguramente deberá recurrirse a simuladores del proceso que permitan evaluar las distintas condiciones de operación, la controlabilidad, seguridad, etc; además del aspecto económico propiamente dicho.

II.5 ETAPAS EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS

En el ejemplo anterior solo se pretendió mostrar, en forma muy sintética y elemental, una aproximación a algunas de las etapas comunes y metodologías disponibles para la generación de estructuras convenientes; y a su vez, el gran esfuerzo que ello significa, en particular si imaginamos una idea a nivel de propuesta o de ensayo de laboratorio, y el problema de su implementación en un proceso real.

Como ya mencionamos, es evidente que dada la existencia del enorme número de alternativas para un proceso dado y la necesidad de analizar la viabilidad de las mismas, siempre existirá la necesidad de simular los diversos arreglos para chequear innumerables cuestiones operativas, al principio sólo a nivel de balances de materia y energía. Seguidamente, avanzando ya en el diseño al adoptar una estructura básica, deberán analizarse numerosos items, desde el diseño propiamente dicho, los aspectos dinámicos y el control, hasta la política de puesta en marcha y parada, con los consiguientes agregados de equipos y verificaciones de lazos de control y área de intercambio, etc.; y por último (pero no menos importante) los aspectos de confiabilidad del proceso, que deberán estudiarse desde el mismo momento que comienza la síntesis del *flowsheet*, pero que deben verificarse cuantitativamente después de definidas las características operativas y de diseño de los diversos equipos. Por ejemplo, la simulación de diversos estados transitorios ante fallas críticas, para decidir el nivel de protección y redundancia en las distintas alarmas, bombas y compresores en paralelo (redundantes), sistemas de alivio, etc. En la Figura (II.17) se esquematizan someramente los distintos pasos que se llevan a cabo normalmente en la tarea del diseño de procesos químicos. En ellos se indica el uso genérico que puede darse a la herramienta de simulación durante la tarea normal de diseño.

Hasta aquí hemos discutido los aspectos inherentes al diseño de procesos. Sin embargo, existe todo otro capítulo que corresponde a la operatividad u operabilidad de los mismos, esto es, su puesta en marcha, operación normal y en las condiciones óptimas, la optimización en línea para encontrar el nuevo punto óptimo ante cada variación en los parámetros de entrada (materias primas, condiciones ambientales), etc.

En este caso, más que la simulación estacionaria resulta muy útil la simulación dinámica, y en particular, la que se lleve a cabo en tiempo real, debido a que se trata de optimizar las condiciones en *operación* ante modificaciones en las condiciones de contorno del proceso, o bien durante la supervisión del mismo, o el diagnóstico de fallas, etc. Por ejemplo, podemos imaginar un sistema de control inteligente que en vez de tener fijos los set points de cada controlador, o bien depender del operador para sus cambios, éstos sean fijados por el sistema de supervisión en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tiempo real (automáticamente) ante cada cambio, de manera de optimizar la *performance* según una función objetivo previamente especificada.

Sistemas de Información Integrados.

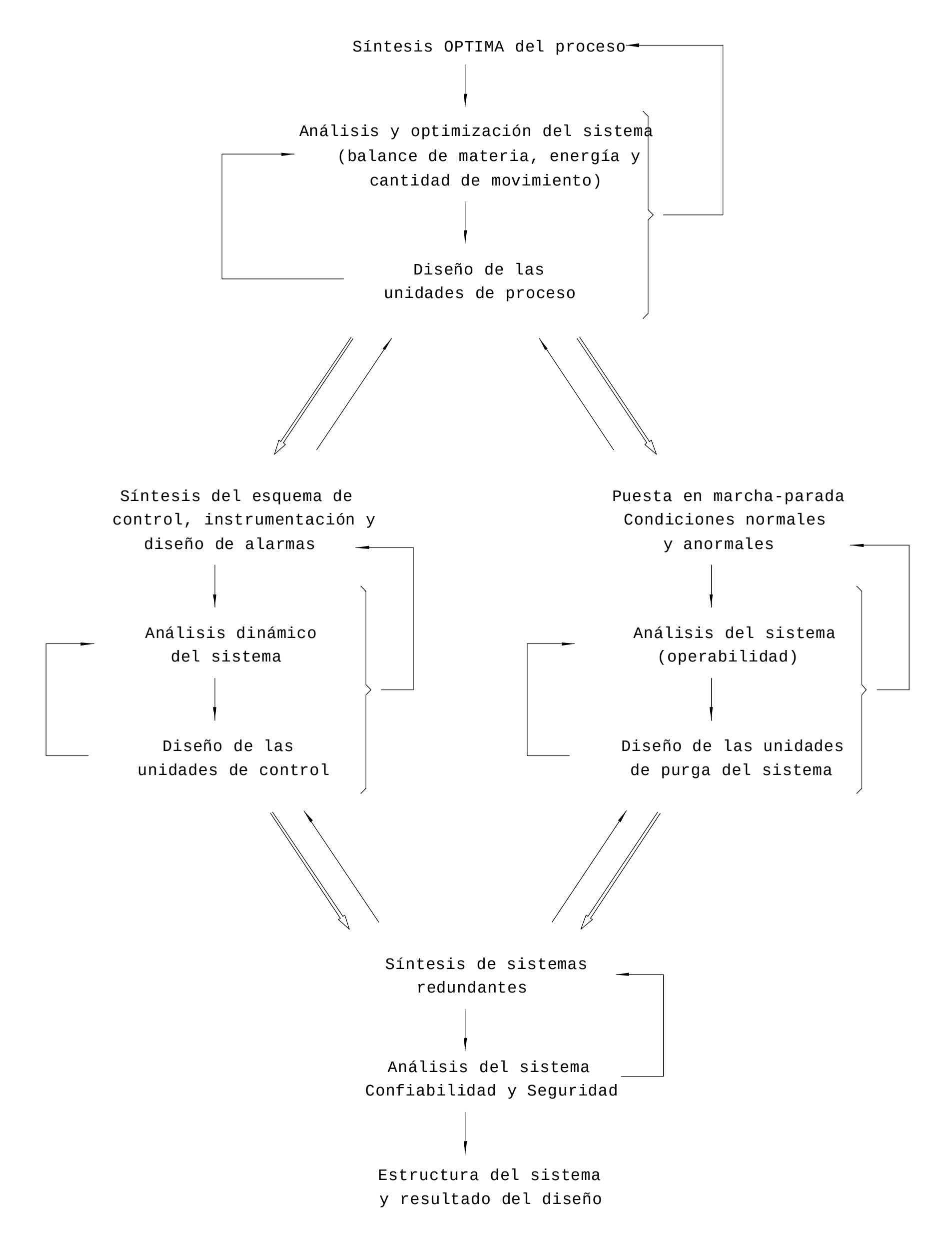
Muchas de las tareas de supervisión de procesos requieren de la disponibilidad de una gran cantidad de datos. Como se mencionó anteriormente (ver Capítulo I.5), no existe una sola herramienta que lleve a cabo adecuadamente todas las tareas que comprende la actividad de diseño o la supervisión de un proceso en operación. Además, la evolución histórica hizo que se generaran distintas implementaciones (software y hardware) para la solución de diversos aspectos parciales (sistemas de control, simulación estacionaria, simulación dinámica, programas de diseño de diversos equipos, etc.), pero cada uno en forma autónoma y poco compatible con el resto.

A partir de la gran diversidad de aplicaciones existentes, por un imperativo de la realidad, se está realizando un gran esfuerzo para lograr un entorno único de aplicación que permita un diálogo eficaz entre las distintas herramientas, no sólo de diseño, sino también de administración (stock, costos, programación de la producción, ventas, compras, evolución del mercado, etc.). El objetivo consiste en integrar toda la información disponible acerca de la empresa en un único ambiente, útil para el soporte en la toma de decisiones, cualquiera sea el punto de vista o gerencia que demande dicha tarea.

Este nuevo campo, el de *los sistemas de información aplicados a las industrias de proceso*, como base para el gerenciamiento de la información y toma de decisiones, evolucionará en forma muy dinámica en las próximas décadas, haciendo que muchas de las herramientas de síntesis y análisis aquí someramente discutidas, como así también las de soporte para la operabilidad y supervisión del proceso en tiempo real, cambien radicalmente su filosofía, haciéndolas más flexibles, más abiertas al usuario, más fácilmente adaptables a casos particulares, y minimizando la distinción entre operación y diseño del proceso, datos para la administración o para la producción, para el sector mantenimiento (preventivo o predictivo) o para el departamento control de calidad o bien para evaluar la confiabilidad del proceso, o para asesoramiento al operador en la tarea de supervisión o diagnóstico de fallas en tiempo real. Estas tareas mencionadas no son un listado exhaustivo, solamente constituyen un conjunto indicativo entre muchas de las que hoy son llevadas a cabo con el auxilio de sistemas computacionales, y que en un futuro no muy lejano serán integradas (intercambiarán información) en un único entorno o ambiente de aplicación.

En efecto, en la sección I.5 mencionamos someramente las características propias de los sistemas auxiliares para el gerenciamiento de la información, y la necesidad de contar con herramientas computacionales compatibles.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



Actividades iterativas durante el diseño de procesos químicos.

Figura II.17

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Desde este punto de vista, no debe confundirse la dificultad que mencionamos para lograr un algoritmo que englobe a todas las tareas del ciclo síntesis-análisis-optimización, con la disponibilidad de un entorno computacional o ambiente informático integrado en el cual justamente las herramientas parciales intercambian información, a los efectos de facilitar la tarea iterativa propia del diseño. En este sentido, se está evolucionando hacia una síntesis de los diversos algoritmos en un único procedimiento, y la integración de las herramientas informáticas parciales en un único ambiente de interacción. Seguramente, de la convergencia de ambas corrientes se obtendrán próximamente contribuciones importantes en la disciplina del diseño de procesos asistido por computadora.

He aquí la verdadera dimensión del problema! He aquí también una idea acerca de qué se deberá lograr en el campo del modelado de procesos, y su implementación en algoritmos computacionales. En el resto del libro intentaremos dar una breve noción de los aspectos asociados al modelado y su implementación en algoritmos computacionales para la simulación (y optimización) estacionaria o dinámica de procesos químicos, y algunos de sus usos más comunes. Lamentablemente, abarcar la totalidad de los aspectos mencionados es muy difícil de lograr en un solo volumen. No obstante, en todos los casos se trata de incentivar la lectura de otros trabajos que tratan temas complementarios o profundizan lo aquí desarrollado, con la esperanza que resulten de utilidad para aquellos deseosos de profundizar en los temas discutidos en el presente capítulo.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) En base a qué enfoques se puede plantear la tarea de síntesis de procesos y cuáles son las características de cada uno de ellos?

P2) Qué ventajas y desventajas implica la descomposición de un proceso en subunidades, como metodología para la generación del flowsheet del mismo? El problema es aún combinatoriamente explosivo?

P3) Qué procedimientos de descomposición de un proceso conoce? Discuta las similitudes y/o diferencias que encuentre entre ellos.

P4) Seleccione un flowsheet de una revista (por ejemplo, Hydrocarbon Process). Identifique las corrientes calientes y frías, discuta como construir las supercorrientes que correspondan y cuál es el procedimiento para determinar el mínimo y el máximo consumo de servicios auxiliares para el sistema.

P5) Que importancia tiene la determinación del punto *pinch* para el diseño del sistema de intercambio energético, considerando simultáneamente la generación de potencia?

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P6) Se requiere separar una corriente efluente proveniente de una unidad de hidrogenación en sus componentes puros utilizando destilación convencional. Esquematice las posibles secuencias de separación, sabiendo que las características de la mezcla se describen a continuación:

Componente	Flujo Molar (kgmol/hr)	Volatilidad Relativa
Propano (C_3)	10.0	8.1
Buteno (B_1)	100.0	3.7
n-Butano (nB)	341.0	3.1
Buteno-2isómero (B_2)	187.0	2.7
n-Pentano (C_5)	40.0	1.0

P7) Aplique los heurísticos dados, además de los que Ud. proponga, para determinar la secuencia más favorable para el problema (P6).

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- Aguirre P. A., Scenna N. J. y Mussati S., "Thermodynamic Synthesis of Cogeneration Systems in Thermal Desalination Plants, Including Gas Turbines", *IDA World Congress on Desalination and Water Reuse*, Vol IV, 383-394, Madrid (1997).
- Argnihotri R. B. y Motard R. L., "Reaction Path Synthesis in Industrial Chemistry", *ACS Symp. Series, Computer Applications to Chemical Process Design and Simulation*, 124, 193 (1980).
- Benz S. J."Síntesis Óptima de Trenes de Destilación Flexibles con Integración Calórica", Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 1991.
- Benz S. J. y J. Cerdá, "Optimal Synthesis of Flexible Heat-Integrated Distillation Trains",*Computer Chem. Engn.*, 16, 8, 753-776 (1992).
- Cerdá J., B. Linnhoff y A. W. Westerberg, "Minimun Utility Usage in Heat Exchanger Network Synthesis: A Transportation Problem", *Chem. Eng. Sci.*, 38, 373 (1983).
- Corey, E. J. y W. T. Wipke. "The Computer- Assisted Synthesis of Complex Organic Molecules", *Science*, 116, 179 (1969).
- Douglas J., "Conceptual Design of Chemical Processes", Mc Graw-Hill Co, 1988.
- Galli M. R. "Síntesis Óptima de Redes de Intercambio Flexibles", Tesis Doctoral, Facultad de Ingeniería Química, Universidad Tecnológica

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nacional, Santa Fé, Argentina, 1990.

- Galli M. R. y J. Cerdá, "Synthesis of Flexible Heat Exchange Networks - III: Temperature and Flowrates Variations.", *Computer chem Engng*. 15 (1), 7-24 (1991).
- Gelernter, H.., N. S. Sridharan, A.J. Hart, F. W. Fowler y H. J. Shue, "An Application of Artificial Intelligence of the Problem of Organic Synthesis Discovery", Technical Report. Departaments of Computer Science and Chemistry, SUNY at Stony Brook, Agosto (1971).
- Gelernter, H.., N. S. Sridharan y A.J. Hart. Topics in Curr. Chem., 41, 113 (1973).
- Govind, R. y G. Powers. "Studies in Reaction path Synthesis", *AIChE J.*, 27, 429 (1981).
- Govind, R. y G. Powers. "Control Systems Synthesis Strategies", *AIChE J*, 28, 60 (1982).
- Grossmann, I. E. "Mixed Integer programming Approach for the Synthesis of Integrated Process Flowsheets", *Comp and Chem. Engng.*, 9, 463-482 (1985).
- Hendry J. E., D. F. Rudd y J. D. Seader. "Synthesis in the Design of Chemical Processes", *AIChE J.*, 19, 1 (1973).
- Hendry J. E. y R. R. Hughes. "Generating Separation Process Flowsheets", *Chem.Eng.Prog.*, 68, 69 (1972).
- Hlavacek V. "Journal Review: Synthesis in the Design of Chemical Processes", *Comput. Chem. Eng.*, 2, 67 (1978).
- Hohmann E. C., "Optimun Networks for Heat Exchnage", Ph. D. Thesis, Chemical Engineering, University of Southhern California, Los Angeles, CA, 1971.
- Irazoqui H. A., "Optimal Thermodynamic Synthesis of Thermal Energy Recovery Systems", *Chem. Eng. Sci.* 41, 1243-1255 (1986).
- Kaibel, G., Blass. E., y Koehler J., "Thermodynamics Guideline for the Development of Distillation Columns Arrangements", *Gas Sep.& Purif.*, 4, 109-114 (1987).
- Koehler, J., Aguirre, P. y E. Blass, "Evolutionary Thermodynamic Synthesis of Azeotropic Distillation Sequences", *Gas Sep.& Purif.*, 6, 3, 153-167 (1992).
- Linnhoff, B. "Use Pinch Analysis to Knock Down Capital Cost and Emissions", *Chem. Engn. Prog.*, Agosto (1994).
- Linnhoff B. y J. R. Flower. "Synthesis of Heat Exchanger Networks". *AIChE J.*, 24, 633 (1978).
- Linnhoff B. y E. Hindsmarsh. "The Pinch Design Method for Heat Exchanger Networks", *Chem. Eng. Sci.*, 38, 5, 745-763 (1983).
- Linnhoff B. y S. Paker. "Heat Exchanger Networks with Process

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Modifications", *IchemE 11th Annual Res Meeting*, April, bath, U.K., 1984.

- Linnhoff, B. y J.A. Turner. "Simple Concepts in Process Synthesis give Energy Savings and Elegant Designs", the Chemical Engineer. pp 621-624, Octubre, 1980.
- Linnhoff, B. y D.W. Townsend. "Designing Total Energy Systems", *Chem. Engn. Prog.*, 78, 7, 72-80 (1982).
- Linnhoff, B., Townsend, D. W., Boland, D. Hewitt, G.F., Thomas, B.E.A., Guy, A.R.; Marsland, R.H.; Flower, J.R., Hill, J.C., Turner, J.A. y D. A. Reay. "User Guide on Process Integration for the Efficient use of Energy", The Institute of Chemical Engineers, London, 1982.
- May D. y D. F. Rudd, "Development of Solvay Clusters of Chemical Reactions", *Chem. Eng. Sci*., 31, 59 (1976).
- Morari, M., Y. Arkun, y G. Stephanopoulos. *AIChE J*., 26, 220 (1980).
- Nishida N., G. Stephanopoulos y A. W. Westerberg, "A Review of Process Synthesis", *AIChE J.*, 27, 321 (1981).
- Nishimura H. "A Theory for the optimal Synthesis of heat exchange systems", *J. Optimization Theory Appl.*, 30, 423-450 (1980).
- Petlyuk, F.B., Platonov V.M. y D. M. Slavinskii. "Thermodynamically Optimun Method for Separating Multicomponent Mixtures", *Int. Chem. Eng.*, 5, 3, 555-561 (1965).
- Rudd D. F. "The Synthesis of System Design: I. Elementary Decomposition Theory", *AIChE J.* 14, 343 (1968).
- Rudd, D.F., G.J. Powers y J.J. Siirola, "Process Synthesis", Prentice Hall, NJ (1973).
- Rotstein, E. y G. Stephanopoulos. "Studies on the Synthesis of Reaction Paths. Part I".*Annual AIChE Meeting,* Chicago, November, 1980.
- Scenna N. J., "Síntesis de procesos de Desalinización Térmica", Tesis Doctoral, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fé, Argentina, 1987.
- Shenoy U. V. "Heat Exchanger network Synthesis", Gulf Publishing Co, 1995.
- Stephanopoulos G. "Synthesis of Process Flowsheets: An Aventure in Heuristic Design or a Utopia os Mathematical Programming?", *en R.S.H. Mah and D. Seider (eds.), Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design*, 2, 439, Engineering Foundation, New York (1981).
- Stephanopoulos G. y D. W. Townsend. "Synthesis in Process Development". *Chem Eng Res Des*, 64, mayo, 1986.
- Stephanopoulos G. y A. W. Westerberg. "Studies in Process Synthesis-II: Evolutionary Synthesis of Optimal Process Flowsheets", *Chem. Engn. Sci.*, 31, 195-204 (1976).
- Takama N. y T. Umeda "Multi-level, Multi-objective Optimization in Process Engineering", *Chem. Engng. Sci.*, 36, 129-136 (1980).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Thompson R.W. y J.C. King. "Systematic Synthesis of Separation Schemes", *AIChE J.*, 18, 941 (1972).
- Townsend, D.W. y B. Linnhoff. "Heat and Power Networks in Process Integration: I. Criteria for the Placement of Heat Engines and Heat Pumps in Process Networks". *AIChE J.*, 29, 742-748 (1983).
- Umeda, T. "Computer Aided Process Synthesis", *Proceedings of Process Systems Engineering Symposium*, p. 79, Kyoto, Japan, 1982.
- Umeda T. Y T. Kuriyama. "A Logical Structure for Process Control System Synthesis", *Proc. of IFAC Congress, Helsinki, Finland*, 1978.
- Umeda T., T. Kuriyama, S. Kobayashi y A. Ichikawa. *Comput.Chem.Eng.*, 4, 3 (1980).
- Umeda T., Niida K. y K. Shiroko. "A Thermodynamic Approach to Heat Integration in Distillation Systems". *Computers & Chem. Engng.*, 25, 423 (1979a).
- Umeda T., Niida K. y K. Shiroko. "A Thermodynamic Approach to the Synthesis of Heat Integration Systems in Chemical Processes". *Computers & Chem. Engng.*, 3, 273 (1979b).
- Umeda T. y A. Ichikawa. "Synthesis of Optimal Processing Systems by a Method of Decomposition", *AIChE Meeting*, Dallas, TX (1972).
- Westerberg A. W., H.P. Hutchinson, R.L. Motard y P. Winter. "Process Flowsheeting", Cambridge Univ. Press, Cambridge, England (1979).
- Westerberg A. W. "A Review of Process Synthesis", *en Computer Applications to Chemical Engineering, R.G. Squires and G.V. Reklaitis (eds), ACS Symposium Series*, (1980).
- Westerberg A. W. "A Review of the Synthesis of Distillation Based Separation Systems" *Conferencia Internacional sobre Nuevos Desarrollos Conducentes a Tecnologías de bajo Consumo Energético*, Santa Fe (1983).
- Wipke W. T. *Computer Representation and Manipulation of Chemical Information*, Wipke y col. (Ed.), Wiley, Ney York (1974).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO III

REVISIÓN DE MÉTODOS NUMÉRICOS APLICABLES EN SIMULACIÓN DE PROCESOS EN ESTADO ESTACIONARIO

Por
H. J. Espinosa, P. Aguirre y G. A. Pérez

III.1 CONCEPTOS BÁSICOS

La solución de una ecuación no lineal o de una función trascendente, como método, supone la búsqueda de un valor tal que satisfaga la ecuación o función en cuestión.

Si $f(x)$ es una función no lineal genérica y x^* es la solución o raíz, entonces se cumple que

$$f(x^*) = 0 \qquad (1)$$

Otra forma alternativa de formular el problema es:

$$x^* = F(x^*) \qquad (2)$$

donde $F(x)$ es una función diferente de la original, y supone que puede explicitarse de la primitiva, cumpliéndose para ello el teorema de funciones implícitas.

Una *solución iterativa* significa comenzar con un valor inicial, x_0, y generar una sucesión (secuencia) $x_0, x_1, x_2, ..., x_n$, tal que:

$$\{x_n\} \,/\, \lim_{n \to \infty} x_n = x^* \qquad (3)$$

donde n representa el número de iteración (término de la correspondiente sucesión).

El *error exacto en la iteración n* es:

$$E_n = |x_n - x^*| \qquad (4)$$

Las hipótesis usuales son que $f(x)$, $F(x)$ y x^* satisfacen las siguientes restricciones:

i.- x^* se sitúa dentro de: $I = [a, b] / f(x) \wedge F(x) \in \mathbb{C}_I$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ii.- Hay una sola raíz (única) en *I* y es real ($x^* \varepsilon \mathbb{R}$).

donde el símbolo ∧ representa el operador lógico *y* y C_1: funciones continuas.

A pesar de que no se diga, todos los métodos usuales se basan en dichas hipótesis. De no ser así se requerirán métodos especiales.

III.2 MÉTODOS BÁSICOS. DISCUSIÓN DE LA CONVERGENCIA

En general, los métodos de mayor *orden de convergencia* llegan a la solución en un número menor de iteraciones. Las excepciones se producen al inicializarlos (o proponer las primeras estimaciones) con valores numéricos muy inapropiados. De todos modos, el menor número de iteraciones no necesariamente significa el menor tiempo computacional, dado que éste depende del esfuerzo de cálculo involucrado en cada iteración. El cálculo de *f(x)* es el mayor consumidor de tiempo junto con el cálculo de su derivada, *que para el caso de una ecuación o función única pueden suponerse equivalente*. El número de estas evaluaciones suele ser una medida más adecuada de la eficiencia del método de solución.

Los métodos iterativos hallan la solución exacta (si eso ocurre) *sólo en un número infinito de iteraciones* (Ecuación (3)). En la práctica, las iteraciones se detienen cuando el error es menor que una adecuada tolerancia, impuesta por el usuario. El valor exacto del error (Ecuación (4)) no puede usarse como criterio de terminación, porque normalmente no se conoce.

Por lo tanto, como criterio de finalización se usa una estimación del denominado error exacto, y es así como interviene la tolerancia de error adoptada, E_d.

Los criterios generalmente usados son:

$$|f(x_n)| < E_d \tag{5.1}$$

$$|x_n - x_{n-1}| < E_d \tag{5.2}$$

$$|x_n - x_{n-1}| < E_d\,|x_n| \tag{5.3}$$

Los dos primeros comparan errores absolutos, mientras que el tercero analiza errores relativos. Estos criterios pueden tener limitaciones, como veremos, y existen propuestas alternativas que resuelven el problema.

Una comparación de los métodos más usados puede verse en la tabla siguiente:

Tabla III.1: Métodos más usuales.

MÉTODO	ORDEN DE CONVERGENCIA	INFORMACIÓN PARA CALCULAR x_{n+1}
BISECCIÓN	LINEAL (1)	$f(x_n)$, $f(x_{n-1})$
SECANTE	SUPERLINEAL (1.618)	$f(x_n)$, $f(x_{n-1})$
NEWTON-RAPHSON	CUADRÁTICO (2)	$f(x_n)$, $f'(x_n)$
SUSTITUCIÓN DIRECTA	LINEAL (1)	$F(x_n)$

Evidentemente, en nuestro campo de aplicaciones importan las raíces reales de *f(x) = 0*. El hecho de analizar una función trascendente primero (o una función o ecuación no lineal) es debido a la relación con los sistemas de ecuaciones, tanto lineales como no lineales, y también porque introduce y educa en la generación de *algoritmos*, y en los problemas asociados con la convergencia: factibilidad y velocidad.

Un concepto básico asociado con los métodos iterativos es el llamado *orden de convergencia* del método. Si definimos el error en la iteración *n*, como E_n, entonces si existe un número real $p \geq 1$ tal que:

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - x^*|}{|x_n - x^*|^p} \equiv \lim_{n\to\infty} \frac{|E_{n+1}|}{|E_n|^p} = K \neq 0 \qquad (6)$$

se dice que *el método es de orden p*, en x^*. La constante *K* se llama *constante de error asintótica*, y depende de *f(x)*. A mayor orden de convergencia, el método convergirá a mayor velocidad. Pero no implica, obviamente, garantía de convergencia.

Otra medida usual es aquella que se hace para saber cuánto se debe computar, para alcanzar una cierta precisión en la raíz buscada. En este caso, además del orden interviene el *costo computacional por iteración* que es importantísimo para definir la *eficiencia* de un método.

III.3 PRINCIPALES MÉTODOS

III.3.1 El Método de Bisección

Es interesante considerarlo porque naturalmente es lo primero que uno haría, si fuera capaz de graficar (o conocer la gráfica) de la función *f(x)* en cuestión. Además, su basamento se puede probar, y dentro de ciertas pautas da garantía de éxito.

Si las raíces de interés práctico son aisladas, esto es los valores de x han sido divididos en distintos intervalos, en cada uno de los cuales sospechamos que se encuentra alguna raíz de importancia para nuestro fines, posibilita garantía de convergencia a la misma. Existe un teorema, que dice: *Si f (x) es continua desde x=a hasta x=b, y si f (a) y f (b) tienen signos opuestos, luego hay como mínimo una raíz*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

real de f (x) = 0, entre a y b.

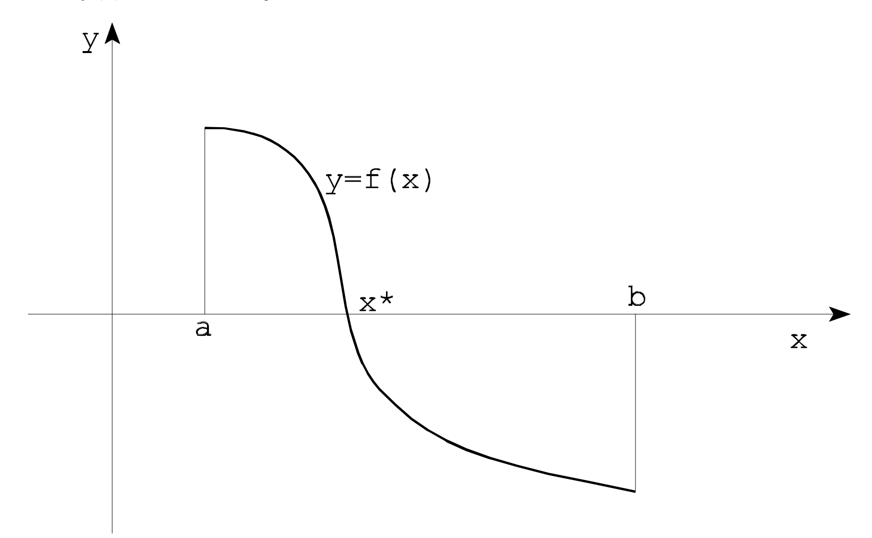


Figura III.1: Raíz aislada de una ecuación.

Basado en el teorema anterior, supongamos (tal como se aprecia en la Fig. (III.1)) que f (x) es continua y positiva en $x = a$ y negativa en $x = b$. Luego, habrá una raíz entre a y b. Si, entonces, dividimos el intervalo $I = [a, b]$ por la mitad, podemos calcular $f\,[(a+b)/2]$, teniendo tres posibilidades, a saber:

i.- Que sea cero (dentro de cierto error), en cuyo caso es la raíz.

ii.- Que sea negativo, en cuyo caso la raíz está entre $x = (a+b)/2$ y $x = a$.

iii.- Que sea positivo, entonces se encuentra entre $x = (a+b)/2$ y $x = b$.

De modo que el procedimiento continua bisectando el intervalo cada vez, hasta lograr la raíz dentro de la precisión deseada.

Cada repetición reduce el error máximo por un factor de *2* (dos), de manera que tres iteraciones producen una mejora aproximada de un orden de magnitud. Su gran virtud es que *asegura la convergencia*, que constituye una propiedad que no encontramos en los otros métodos. A cambio de ello, puede ser tremendamente lento lo que lo puede transformar en ineficiente, debido a que es lineal (orden 1).

Otro método que converge para toda función continua es el denominado *Método de la Falsa Posición o Regula Falsi* (ver Figura (III.2)).

Mecánica (algoritmo)

x_1 y $x_2 / f(x_1).f(x_2) < 0$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

luego → x_3

si: $f(x_3).f(x_1) < 0 \; ; \; i = 1, 2$

(en este caso $i = 1$)

se repite x_4 y continúa.

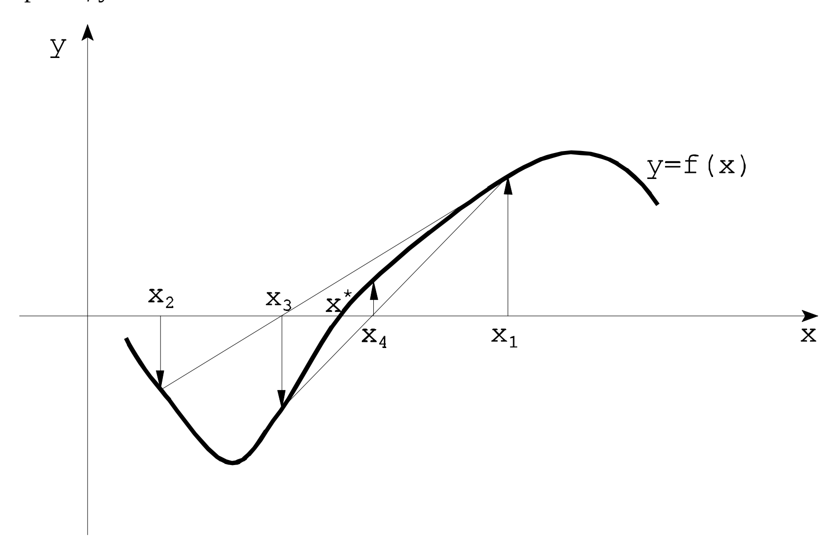


Figura III.2: Método Regula Falsi.

Se ve que:

$$x_3 = \frac{y_2}{y_2 - y_1} x_1 + \frac{y_1}{y_1 - y_2} x_2 \tag{7.1}$$

$$x_4 = \frac{y_3}{y_3 - y_1} x_1 + \frac{y_1}{y_1 - y_3} x_3 \tag{7.2}$$

Si $f(x)$ es *cóncava* entre x_1 y x_2 se dice que el método es *estacionario*; esto es, el punto x_1 es siempre uno de los dos puntos usados para la siguiente iteración (ver Figura (III.3)). Lo mismo ocurriría si fuese convexa en las inmediaciones de la raíz, provocando una convergencia lineal en estos casos.

Una mejora que lo hace más eficiente consiste en aplicar la fórmula hallada (Ecuación (7.2)) a los puntos x_{i-1} y x_{i+1} , pero reemplazando

$$y_{i-1} \; por \; \alpha \; y_{i-1} = \bar{y}_{i-1}, \; tal \; que \; 0 < \alpha < 1 \tag{8}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Esto es:

$$x_{i+2} = \frac{\alpha\, y_{i-1}}{\alpha\, y_{i-1} - y_{i+1}}\, x_{i+1} + \frac{y_{i+1}}{y_{i+1} - \alpha\, y_{i-1}}\, x_{i-1} \qquad (9)$$

Si cambia el signo debe retornarse el método original, de lo contrario se continúa con la mejora presentada. Las elecciones más simples para α son:

$-\alpha = ½$ (*Método Illinois*)

$$-\alpha = \frac{y_i}{y_i + y_{i+1}} \quad (\textit{Método Pegaso})$$

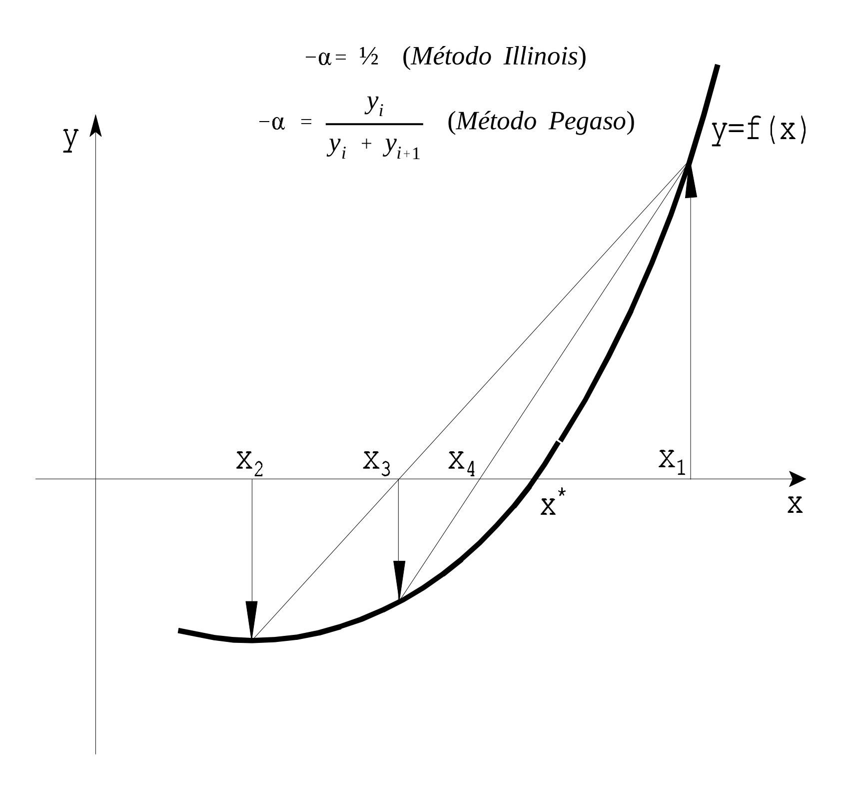


Figura III.3: Método Regula Falsi para funciones cóncavas.

Estas mejoras incrementan el orden, y los hace superlineales (Illinois: *1.44* y Pegaso: *1.64*). Son algoritmos muy buenos cuando tenemos dos puntos en los cuales *f(x)* tiene signo opuesto. En caso de no querer hacer un esfuerzo computacional en hallarlos, se pueden usar *interpolación lineal inversa* con los dos últimos puntos computados para generar el siguiente. En este caso resulta:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$x_{i+1} = \frac{y_i}{y_i - y_{i-1}} x_{i-1} + \frac{y_{i-1}}{y_{i-1} - y_i} x_i \qquad (10)$$

A este método estacionario se lo denomina *método de la secante*. Requiere de dos aproximaciones iniciales (recordar Tabla (III.1)), y sólo si son cercanas a la raíz el método es convergente. Pero tiene la ventaja de ser super lineal (orden de convergencia = *1.618*). Su nombre se debe, según la Ecuación (10), a que se puede escribir:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{x_i - x_{i-1}}{y_i - y_{i-1}} y_i \qquad (11)$$

expresión que será de utilidad cuando discutamos métodos para sistemas de ecuaciones.

En la Ecuación (11) se pone de manifiesto un problema típico de errores en cálculo numérico. Se ve que cerca de la solución y_i e y_{i-1} son cantidades parecidas con lo que aparece el *problema de cancelación sustractiva* en ese segundo término; que es un término de corrección que estará aportando muy pocos dígitos significativos, lo que obliga a usar doble precisión (término computacional que implica la cantidad de dígitos retenidos) si queremos acercarnos a x^* con mucha precisión.

III.3.2 Métodos de Newton-Raphson. Usos de la Derivada de la Función

Si basados en la Ecuación (11), expresión de la secante generalizada, modificamos el término corrector de modo que aparezca la pendiente en el punto, obtendremos el conocido método de Newton-Raphson. Es decir, si:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{y_i}{\dfrac{y_i - y_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}} = x_i - \frac{f(x_i)}{\dfrac{f(x_i) - f(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}}} \qquad (12)$$

se puede hacer que:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)}{f^{/}(x_i)} \qquad (13)$$

expresión del algoritmo que nos interesa.

Otra forma de entender la propuesta es suponer una expansión en serie de Taylor, truncada en el primer término (linealización de la función). Esto es:

$$f(x_{i+1}) \cong f(x_i) + f'(x_i)\,(x_{i+1} - x_i) + \ldots \qquad (14)$$

$y = f(x_{i+1})$ es tal que es un valor muy cercano a x^*, tal que si: $y_{i+1} \equiv f(x_{i+1}) = 0$, tenemos:

$$f(x_i) \cong -f'(x_i)\,(x_{i+1} - x_i) \qquad (15)$$

que conduce, reordenando, a la Ecuación (13) básica del método.

Su ventaja es el orden de convergencia ($p = 2$, cuadrática) y su desventaja principal es la evaluación de la derivada de la función, ya sea analítica o numérica, como se verá en los casos de interés práctico.

***Ejemplo*:**

Sea la siguiente función, que por lo sencilla pueden conocerse sus raíces, de tal forma de ilustrar la mecánica del método: $f(x) = x^2 - 3x = 0$, con raíces 0 y 3. Encontrar una de sus raíces por N-R. Para ello como vimos necesitamos un valor inicial supuesto, o semilla. Sea éste $x_0 = 1$, y el criterio de tolerancia: $|f(x)| \leq 10^{-3}$.

$f(x_0) = -2$, distinto de cero, luego:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$$

$f'(x) = 2x - 3$, luego:

$x_1 = 1 - (-2) / (-1) = -1.$

$f(x_1) = 1 + 3 = 4 \neq 0$, luego:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = (-1) - 4/(-5) = -0.2$$

$f(-0.2) = 0.64, \neq 0$, luego:

$$x_3 = x_2 - \frac{f(x_2)}{f'(x_2)} = (-0.2) - (0.64)/(-3.4) = -0.0118$$

$f(x_3) = -$ 0.0.0354

$$x_4 = x_3 - \frac{f(x_3)}{f'(x_3)} = (0.0118) - (0.0354)/(-3.0235) = -4.577\ 10^{-5}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ello implica que x_4 es raíz de la función dada, dentro del margen de tolerancia especificado.

III.3.3 Sustitución Directa o Aproximaciones Sucesivas

Dada una función o una ecuación, si puede resolverse en forma explícita para una variable, es decir si:

Dado: *f(x) = 0*

Se propone: *x = F(x)*

esto es, explicitando la variable independiente, se puede, entonces, establecer la fórmula para un *algoritmo de un solo punto y estacionario,* es decir:

$$x_{i+1} = F(x_i) \qquad (16)$$

Su éxito dependerá, evidentemente, del arreglo logrado para la ecuación (esto es:

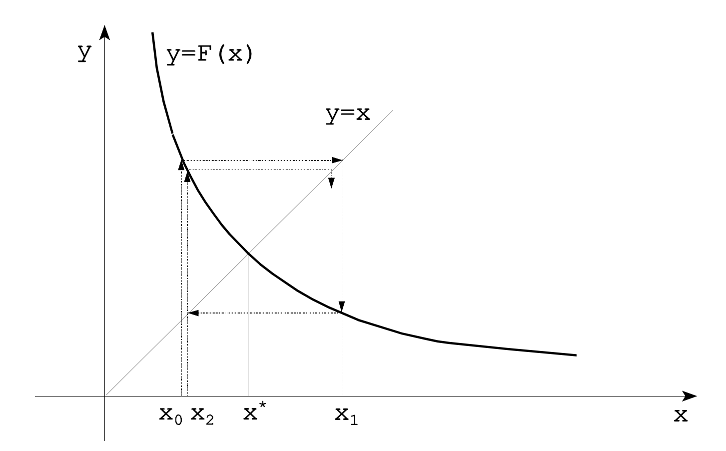


Figura III.4: Método de aproximaciones sucesivas.

F(x)), cuyo análisis permite ver la factibilidad de solución. Esto es, de acuerdo a la Figura (III.4), cuando es convergente (estabilidad del método). Se puede probar -y ver gráficamente- que si:

$$|F'(x)| < 1 \quad ; \quad x \in I\delta x^*$$

es convergente.

***Ejemplo*:**

Sea la misma función del ejemplo anterior. Encontrar una raíz por el método de sustitución directa. Para explicitar x operamos algebraicamente, y obtenemos:

$$x = \sqrt{3x} = F(x), \quad con\ x \geq 0$$

Hacemos $x_0 = 1$, criterio de error (5.10^{-3})
$x_{i+1} = F(x_i)$, entonces:
$x_1 = F(x_0) = 3^{½} = 1.732051$
$x_2 = F(x_1) = 2.279510$
$x_3 = F(x_2) = 2.615060$
$x_4 = F(x_3) = 2.800923$
$x_5 = F(x_4) = 2.898753$
$x_6 = F(x_5) = 2.948942$
$x_7 = F(x_6) = 2.974361$
$x_8 = F(x_7) = 2.987153$
$x_9 = F(x_8) = 2.993570$
$x_{10} = F(x_9) = 2.996783$
$|x_{10} - x_9| = 3.2\ 10^{-3}$, luego, x_{10} es raíz de $f(x)$ dentro del margen de error especificado.
$f(x_{10}) = 0.0096 \neq 0$

Aceleradores de Convergencia: Casos p=1

Son técnicas basadas en extrapolaciones. Si la iteración es convergente, será:

$$x^* - x_{i+1} = K_i\ (x^* - x_i); \ |K_i| < 1 \qquad (17)$$

donde: $|K_i| \rightarrow K$: constante de error asintótico.

Cerca de la convergencia K_i es prácticamente constante (y parecido al valor final de K). De modo que:

$$(x^* - x_{i+1}) \approx K'\ (x^* - x_i) \qquad (18)$$

y eliminando K' entre dos iteraciones

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{(x^* - x_{i+2})}{(x^* - x_{i+1})} \cong \frac{(x^* - x_{i+1})}{(x^* - x_i)} \qquad (19)$$

resolviendo para x^* se obtiene:

$$x^* \cong \frac{x_i \; x_{i+2} - x_{i+1}^2}{x_{i+2} - 2\, x_{i+1} + x_i} \qquad (20)$$

Este resultado es el *procedimiento de Aitken*, de aceleración de convergencia.

De manera que: $x_{i+3} \cong x^*$ es una mejor aproximación (valor extrapolado); y así se continúa con el proceso iterativo, que logra mejorar la performance.

III.3.4 Procedimiento de Wegstein

Es el algoritmo más utilizado para acelerar el método de aproximaciones sucesivas. Incluso, es de gran importancia su implementación en problemas de sistemas de ecuaciones no lineales, como veremos en el próximo capítulo.

La base del mismo es proponer a la clásica iteración de aproximaciones sucesivas un valor *mejorado*, según la siguiente ecuación:

$$\bar{x}_{i+1} = q\; \bar{x}_i + (1 - q)\; x_{i+1} \qquad (21)$$

de modo que:

$$x_{i+2} = F\,(\bar{x}_{i+1})$$

se corrige x_{i+2} y continúa. De la Ecuación (21) se ve que es necesario generar dos valores según el esquema tradicional, y conociendo q comenzar con esta propuesta.

Para analizar el cálculo de q puede ser útil la Figura (III.5), donde se aprecia la aproximación propuesta.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

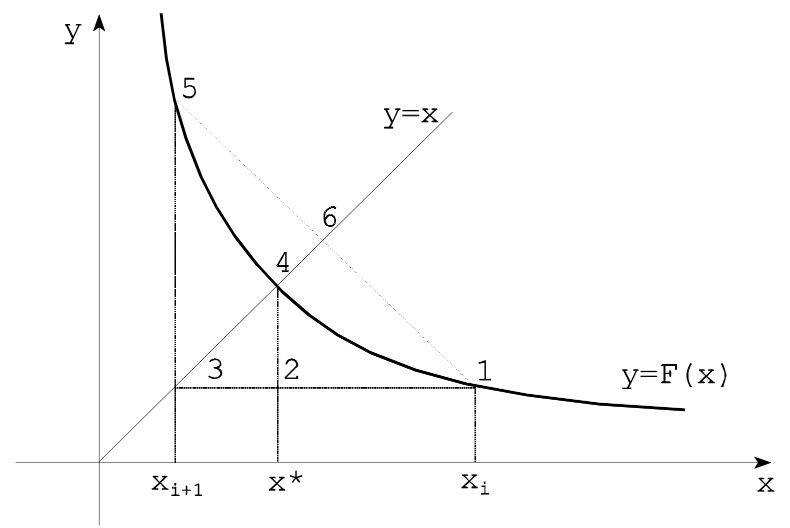


Figura III.5: Método de Wegstein.

Teniendo como idea que:

$$\bar{x}_{i+1} \approx x^*$$

es la definición de *q*, según:

$$x^* = q\, x_i + (1 - q)\, x_{i+1}$$

o sea

$$x^* - x_{i+1} = q\, (x_i - x_{i+1}) \qquad (22)$$

y, de igual modo,

$$x^* - x_i = (1 - q)\, (x_{i+1} - x_i) \qquad (23)$$

resultando

$$\frac{x^* - x_{i+1}}{x^* - x_i} \equiv - \frac{q}{(1 - q)} \qquad (24)$$

Como x^* no se conoce, se debe aproximar. Esto es:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{q}{(1-q)} = \frac{\overline{23}}{\overline{12}} = \frac{\overline{24}}{\overline{12}} \cong \frac{\overline{35}}{\overline{13}}$$

donde los segmentos indicados en los cocientes están determinados en Figura (III.5). Luego:

$$\frac{q}{(1-q)} \cong \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{x_i - x_{i+1}} \tag{25}$$

de donde obtenemos la expresión para el cálculo de q:

$$q \cong \frac{x_{i+2} - x_{i+1}}{x_i - 2\,x_{i+1} + x_{i+2}} \tag{26}$$

En el capítulo siguiente veremos ejemplos de aplicación tanto para una sola ecuación como para sistemas de ecuaciones no lineales, resueltas por este método.

III.3.5 Uso de Fracciones Continuadas

Para problemas de una variable la representación a través de fracciones continuadas ha demostrado tener ciertas ventajas sobre otros métodos tradicionales. La principal es el reducido número de operaciones que requiere su ejecución, con la correspondiente disminución del tiempo de computación.

Este tipo de representación ha sido usado para problemas de interpolación de datos; y se puede extender al caso de búsqueda de raíces que nos interesa.

Si se conocen valores tabulados de una función, es decir: (x_o, f_0), (x_1, f_1),..., (x_n, f_n), para aproximar $f(x)$ se puede proponer la siguiente expresión:

$$f(x) \cong \varnothing_0(x) = a_0 + \cfrac{x - x_0}{a_1 + \cfrac{x - x_1}{a_2 + \cfrac{x - x_2}{a_3 + \cfrac{x - x_3}{\cfrac{\cdots\cdots}{a_{n-1} + \cfrac{x - x_{n-1}}{a_n}}}}}} \tag{27}$$

Que, en forma compacta, puede ser escrita como:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$f(x) \cong \varnothing_0(x) = a_0 + \frac{x - x_0}{\varnothing_1(x)} \tag{28}$$

donde:

$$\begin{aligned} \varnothing_1(x) &= a_1 + \frac{x - x_1}{\varnothing_2(x)} \\ \varnothing_2(x) &= a_2 + \frac{x - x_2}{\varnothing_3(x)} \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \varnothing_{i-1}(x) &= a_{i-1} + \frac{x - x_{i-1}}{\varnothing_i(x)} \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots \\ \varnothing_n(x) &= a_n \end{aligned} \tag{29}$$

Los coeficientes a_i pueden evaluarse con la Ecuación (29). Esto es, si $\varnothing_0(x_i)$ se iguala a los valores f_i , luego se resuelven las ecuaciones que resultan. Es decir: en $x = x_o$

$$\varnothing_0(x_0) = f(x_0) \equiv f_0 = a_0 \tag{30}$$

en $x = x_1$

$$\varnothing_0(x_1) = f_1 = f_0 + \frac{x_1 - x_0}{a_1}$$

luego,

$$a_1 = \frac{x_1 - x_0}{f_1 - f_0} \tag{31}$$

De igual forma se pueden obtener todos los coeficientes.

En el caso de búsqueda de raíces, es decir resolver para los valores de x tal que: $f(x) = 0$, se plantea

$$x = \psi(f) \tag{32}$$

ecuación de la función inversa. Si ésta se aproxima por fracciones continuadas,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$x = \psi_0(f) = a_0 + \cfrac{f - f_0}{a_1 + \cfrac{f - f_1}{a_2 + \cfrac{f - f_2}{a_3 + \cfrac{f - f_3}{\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \; a_{n-1} + \cfrac{f - f_{n-1}}{a_n}}}}} \qquad (33)$$

Luego, sustituimos $f = 0$ en Ecuación (33), de modo que el lado izquierdo sea una aproximación a la raíz buscada,

$$\bar{x} = a_0 - \cfrac{f_0}{a_1 - \cfrac{f_1}{a_2 - \cfrac{f_2}{a_3 - \cfrac{f_3}{\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \; a_{n-1} - \cfrac{f_{n-1}}{a_n}}}}} \qquad (34)$$

La determinación de los coeficientes a_i se lleva a cabo en una forma similar a la ya vista. Esto es, si:

$$x = \Omega_0(f) = a_0 + \frac{f - f_0}{\Omega_1(f)} \qquad (35)$$

donde:

$$\begin{aligned} \Omega_1(f) &= a_1 + \frac{f - f_1}{\Omega_2(f)} \\ &\cdots\cdots\cdots \\ \Omega_{i-1}(f) &= a_{i-1} + \frac{f - f_{i-1}}{\Omega_i(f)} \\ &\cdots\cdots\cdots \\ \Omega_n(f) &= a_n \end{aligned} \qquad (36)$$

la evaluación se hace con la Ecuación (36), poniendo $\Omega_0(f_i)$ igual a x_i y resolviendo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

sucesivamente. En $f = f_0$, $\psi(f_0) = a_0$ (Ecuación 33).

Un algoritmo muy interesante, basado en este método, es el de Shacham (1989). Se denomina de memoria mejorada y se aplica a cualquier ecuación no lineal.

El reemplazo de los polinomios de interpolación de Lagrange por fracciones continuadas mejora los métodos de interpolación inversa, sobre todo en el uso de memoria que requieren. El mencionado algoritmo, para el caso de una ecuación del tipo $f(x) = 0$, se puede describir de la siguiente manera:

1.- Elija dos valores iniciales, x_0 y x_1. Calcule $y_o = f(x_0)$, $y_1 = f(x_1)$.

2.- Compute x_2, con las siguientes ecuaciones:
$a_0 = x_0$
$a_1 = (y_1 - y_0)/(x_1 - x_0)$
$x_2 = a_0 - y_0/a_1$

3.- Haga $n = 2$ y calcule $y_2 = f(x_2)$.

4.- Con las ecuaciones recursivas se calcula x_{n+1}, de modo que:
$b_0 = x_n$
$b_i = (y_n - y_{i-1})/(b_{i-1} - a_{i-1})$; $i = 1,2,3, ..., n-1$
$\psi_n = a_n = (y_n - y_{n-1})/(b_{n-1} - a_{n-1})$
$\psi_{i-1} = a_{i-1} - y_{i-1}/\psi_i$; $i=n, n-1, ..., 1$
$x_{n+1} = \psi_0$

5.- Calcule $y_{n+1} = f(x_{n+1})$.

6.- Verifique la convergencia. Si no converge, haga $n = n+1$, y vuelva a *4*.

III.4 SOLUCIÓN DE SISTEMAS DE ECUACIONES LINEALES SIMULTÁNEAS

III.4.1 Planteo del Problema. Teoremas Básicos

Se trata de resolver n ecuaciones lineales simultáneas con n incógnitas:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_j = b_i \;;\quad i = 1,\, 2,...,\, n \tag{37}$$

o, en su forma compacta matricial

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b} \tag{38}$$

donde $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ es la matriz de coeficientes (cuadrada, nxn) y $\boldsymbol{x}^t = (x_1, ..., x_n)$ es el vector de incógnitas, siendo $\boldsymbol{b}^t = (b_1, ..., b_n)$ el vector de términos independientes. Para el caso que nos interesa, tanto $\boldsymbol{A}$ como $\boldsymbol{b}$ son reales. En adelante se obviará la notación transpuesta de la matriz, suponiendo que en las operaciones entre matrices se

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

disponen éstas de tal forma que sean compatibles para las mismas. Si definimos la denominada matriz aumentada como:

$$\underline{\underline{A}}_b = [\underline{\underline{A}} \quad \underline{b}] \; ; \; n \; . \; (n + 1) \qquad (39)$$

dado que ***b*** es un vector columna; y recordando la definición de rango de una matriz: v(**A**), el teorema básico de existencia de solución establece:

1.- El sistema de ecuaciones (Ecuación(38)) tiene solución *sí y sólo sí:* $v(\mathbf{A}) = v(\mathbf{A_b})$.

2.- Si $v(\mathbf{A}) = v(\mathbf{A_b}) = k < n$, luego las $x_{i1}, x_{i2},..., x_{ik}$ son variables cuyas columnas son linealmente independientes en ***A***, de modo que las restantes *(n-k)* variables pueden asignarse arbitrariamente. O dicho de otra forma, hay una familia paramétrica de *(n-k)* soluciones.

3.- Si $v(\mathbf{A}) = v(\mathbf{A_b}) = n$, hay una única solución.

Corolario: Para el caso homogéneo ($\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$), o sea $\boldsymbol{A} \, . \, \boldsymbol{x} = 0$ habrá solución no trivial, si y sólo si $v(\mathbf{A}) < n$.

Para estos problemas, cosa que no ocurre en el caso no lineal, existe solución analítica (recordemos la denominada *Regla de Cramer*), pero la dificultad reside principalmente en computar esa solución. La evaluación de determinantes no hace práctico dicho procedimiento analítico; luego, el problema es desarrollar algoritmos computacionales más eficientes, es decir que sean más rápidos, sobre todo en el número de operaciones necesarias y que además sean robustos de modo que la solución calculada sea lo más precisa posible.

Un punto vital es discutir cómo se espera que sea la matriz de coeficientes. En general, puede encontrarse entre alguna de estas dos categorías:

i.- Llena pero no muy grande. Es decir con muy pocos ceros, y en donde *n* no sea mayor que *100*, por ejemplo.

ii.- Dispersa y relativamente muy grande, denominadas también ralas. En estos casos, son muy pocos (en relación al orden) los elementos distintos de cero y *n* puede ser mayor a *1000*. Estas matrices son típicas al resolver problemas con ecuaciones diferenciales parciales y también aparecen al plantear modelos de simulación de plantas completas, o bien de procesos con múltiple etapas en serie, como veremos en los próximos capítulos.

Naturalmente, los métodos desarrollados deben estar dirigidos a resolver alguna de estas dos categorías, y si es posible haciendo uso de sus características para incrementar su eficiencia.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Un problema, cual es la condición del sistema, se puede analizar considerando un vector residual $\boldsymbol{r}$, cuando se tiene una solución calculada $\boldsymbol{x_c}$. Es decir:

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}_c \tag{40}$$

se sabe que:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}^* = \underline{b} \;,\; o \;\; \underline{b} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}^* = 0 \tag{41}$$

entonces será:

$$\underline{r} = \underline{\underline{A}} \cdot (\underline{x}^* - \underline{x}_c)$$

luego,

$$(\underline{x}^* - \underline{x}_c) = \underline{\underline{A}}^{-1} \cdot \underline{r} \tag{42}$$

de donde se ve que aunque $\boldsymbol{r}$ tenga elementos muy chicos, si $\boldsymbol{A^{-1}}$ (matriz inversa) contiene muy grandes coeficientes, la diferencia entre $\boldsymbol{x^*}$ y $\boldsymbol{x_c}$ puede ser aún muy grande. Esto permite anticipar la importancia de un escalado en los coeficientes de la matriz $\boldsymbol{A}$ original, ya que aunque el vector residual $\boldsymbol{r}$ impuesto sea pequeño, el error encontrado para la solución puede ser muy grande.

III.4.2 Métodos Directos

Un método directo para hallar la solución es uno en el cual, si todos los cálculos (computaciones) fueran llevados a cabo sin error de redondeo conduciría a la solución exacta del sistema dado. Prácticamente todos están basados en la *técnica de eliminación*. El error de truncamiento para estos métodos es intrascendente.

Eliminación Gaussiana

Desarrollando la Ecuación (42), se obtiene el sistema en la siguiente forma:

$$\begin{array}{l} a_{11}\, x_1 + a_{12}\, x_2 + \dots + a_{1n}\, x_n = b_1 \equiv a_{1,\,n+1} \\ a_{21}\, x_1 + a_{22}\, x_2 + \dots + a_{2n}\, x_n = b_2 \equiv a_{2,\,n+1} \\ \dots\dots\dots \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}\, x_1 + a_{n2}\, x_2 + \dots + a_{nn}\, x_n = b_n \equiv a_{n,\,n+1} \end{array} \tag{43}$$

Se supone que la matriz es no singular, y que $a_{11} \neq 0$ de manera de poder dividir la primer columna por a_{i1} y así restar para las ecuaciones, donde $i=2, \dots, n$. Esto da como resultado:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$
\begin{aligned}
a_{11}\ x_1 + a_{12}\ x_2 + \,.......... + a_{1n}\ x_n &= a_{1,\ n+1} \\
a_{22}^{(1)}\ x_2 + \,........ + a_{2n}^{(1)}\ x_n &= a_{2,\ n+1}^{(1)} \\
.... & \\
.... & \\
a_{n2}^{(1)}\ x_2 + ... + a_{nn}^{(1)}\ x_n &= a_{n,\ n+1}^{(1)}
\end{aligned} \qquad (44)
$$

siendo los $a^{(1)}_{ij}$, tal que:

$$
a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \frac{a_{1j}}{a_{11}}\ a_{i1}\ ;\ i=2,\ ...\ ,\ n \quad ; \quad j=2,\ ...\ ,\ n+1 \qquad (45)
$$

si fuese $a_{11} = 0$ se intercambian columnas, y se opera en consecuencia. Por comodidad se define: $m_{i1} = a_{i1} / a_{11}$ con $i=2, ... , n$.

De igual forma se continúa con el procedimiento haciendo ahora (si $a^{(1)}_{22} \neq 0$) $m_{i2} = a^{(1)}_{i2} / a^{(1)}_{22}$ con $i=3, ..., n$ resultando, al restar, el siguiente sistema:

$$
\begin{aligned}
a_{11}\ x_1 + a_{12}\ x_2 + \,.............. + a_{1n}\ x_n &= a_{1,\ n+1} \\
a_{22}^{(1)}\ x_2 + \,.............. + a_{2n}^{(1)}\ x_n &= a_{2,\ n+1}^{(1)} \\
a_{33}^{(2)}\ x_3 + \,............. + a_{3n}^{(2)}\ x_n &= a_{3,\ n+1}^{(2)} \\
.... & \\
a_{n3}^{(2)}\ x_3 + \,............. + a_{nn}^{(2)}\ x_n &= a_{n,\ n+1}^{(2)}
\end{aligned} \qquad (46)
$$

donde:

$$
a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i2}\ a_{2j}^{(1)} \quad ; \quad i=3,\ ...\ ,\ n \qquad j=3,\ ...\ ,\ n+1 \qquad (47)
$$

Y, continuando con el procedimiento hasta *(n-1)* pasos llegamos al sistema final:

$$
\begin{aligned}
a_{11}\ x_1 + a_{12}\ x_2 + ... + a_{1n}\ x_n &= a_{1,\ n+1} \\
a_{22}^{(1)}\ x_2 + ... + a_{2n}^{(1)}\ x_n &= a_{2,\ n+1}^{(1)} \\
.... & \\
a_{nn}^{(n-1)}\ x_n &= a_{n,\ n+1}^{(n-1)}
\end{aligned} \qquad (48)
$$

con los elementos en la diagonal (distintos de cero), tal que:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$a_{ij}^{k} = a_{ij}^{k-1} - m_{ik}\, a_{kj}^{k-1} \;; \quad k = 1,....., n-1$$
$$j = k + 1,..., n+1$$
$$i = k + 1,..., n \qquad (49)$$
$$a_{ij}^{0} = a_{ij}$$

con $m_{ik} = a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}$

Luego, la solución es fácilmente calculada por sustitución hacia atrás, al terminar el procedimiento de eliminación. Esto es:

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{i-1}} \left[a_{i,n+1}^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)}\, x_j \right] \;,\; i = n,...,1 \qquad (50)$$

Una variante muy importante es el *procedimiento de reducción o eliminación* de Gauss-Jordan. En este caso se procede a eliminar con los elementos diagonales en toda la columna, dejando sólo ese elemento; y se deriva en un sistema que comparando con Ecuación (44), en una primera pasada tiene la forma:

$$a_{11}\, x_1 + a_{13}^{(2)}\, x_3 + ... + a_{1n}^{(2)}\, x_n = a_{1,\, n+1}^{(2)}$$
$$a_{22}^{(1)}\, x_2 + a_{23}^{(1)}\, x_3 + ... + a_{2n}^{(1)}\, x_n = a_{2,\, n+1}^{(1)}$$
$$a_{33}^{(2)}\, x_3 + ... + a_{3,n}^{(2)}\, x_n = a_{3,n+1}^{(2)} \qquad (51)$$
$$.............$$
$$a_{n3}^{(2)}\, x_3 + ... + a_{nn}^{(2)}\, x_n = a_{n,\, n+1}^{(2)}$$

Notar que:

$$a_{2,\, n+1}^{(2)} = a_{2,\, n+1}^{(1)}$$

Siguiendo con el procedimiento se hacen cero todos los elementos, excepto los correspondientes a la diagonal, resultando:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$
\begin{aligned}
a_{11}\ x_1 \quad & = a_{1,\ n+1}^{(n-1)} \\
a_{22}^{(1)}\ x_2 \quad & = a_{2,\ n+1}^{(n-1)} \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots & \\
a_{nn}^{(n-1)}\ x_n \quad & = a_{n,\ n+1}^{(n-1)}
\end{aligned}
\qquad (52)
$$

de modo que la solución es simplemente:

$$
x_i = \frac{a_{i,\ n+1}^{(n-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}} \quad ; \quad i=1,\ \dots\ ,\ n \qquad (53)
$$

A pesar de lo que resulta del procedimiento, la eliminación Gaussiana es la más eficiente de las dos, considerando sólo las multiplicaciones y divisiones (recordar acumulación de error, además), llegando, para grandes sistemas (*n >> 1*), el método Gauss-Jordan a requerir cerca de un *50%* más de operaciones que el de Gauss.

Se ha trabajado mucho para lograr *formas compactas* del método de Gauss, no sólo para ahorrar espacio de almacenamiento (memoria) sino también para mejorar la precisión en los cálculos que más inciden en el resultado. Para ello se han definido matrices especiales en cuanto a la característica de su formulación, las cuales permiten ahorrar tiempo de cálculo una vez aplicadas. No trataremos este punto aquí, remitiendo al lector a la bibliografía recomendada al final del capítulo.

Análisis de errores

Debido a que generalmente no es posible obtener la solución exacta, se considerarán los posibles errores y sus cotas. Las fuentes de error son variaciones en los elementos de ***A*** y de ***b***, ya sea originales o debidas al redondeo. Estudiando primero el caso más simple, que considera cambios sólo en ***b***, será:

$$
\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b} + \underline{\delta b} \qquad (54)
$$

si resulta a su vez:

$$
\underline{x} = \underline{x}^{*} + \underline{\delta x}
$$

se ve que:

$$
\underline{\underline{A}} \cdot (\underline{x}^{*} + \underline{\delta x}) = \underline{b} + \underline{\delta b}
$$

con lo que:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{\underline{A}} \; . \; \underline{\delta x} \; = \; \underline{\delta b}$$

$$\underline{\delta x} \; = \; \underline{\underline{A}}^{-1} \; . \; \underline{\delta b} \qquad (55)$$

y/o, tomando normas:

$$\| \underline{\delta x} \| \;\; \leq \;\; \| \underline{\underline{A}}^{-1} \| \; \| \underline{\delta b} \| \qquad (56)$$

de igual modo:

$$\| \underline{b} \| \; \leq \; \| \underline{\underline{A}} \| \; . \; \| \underline{x}^* \|$$

tal que:

$$\| \underline{x}^* \| \; \geq \; \frac{\| \underline{b} \|}{\| \underline{\underline{A}} \|}$$

resultando el error relativo:

$$\frac{\| \underline{\delta x} \|}{\| \underline{x}^* \|} \; \leq \; \| \underline{\underline{A}} \| \; \| \underline{\underline{A}}^{-1} \| \; \frac{\| \underline{\delta b} \|}{\| \underline{b} \|} \qquad (57)$$

La cantidad $\|\mathbf{A}\| \, \|\mathbf{A}^{-1}\|$ se denomina el *número de condición de* ***A***, $K(\mathbf{A}) \geq 1$ siempre. De modo que:

$$\frac{\| \underline{\delta x} \|}{\| \underline{x}^* \|} \; \leq \; K(\underline{\underline{A}}) \; \frac{\| \underline{\delta b} \|}{\| \underline{b} \|} \qquad (58)$$

Así, si $K(\mathbf{A})$ es cercano a 1, se dice que ***A*** es *bien condicionada*; y si es muy grande nos encontramos frente a un caso *mal condicionado*.

Si la fuente de error fueran los elementos de la matriz de coeficientes, esto es:

$$(\underline{\underline{A}} \; + \; \underline{\underline{\delta A}}) \; . \; (\underline{x}^* \; + \; \underline{\delta x}) \; = \; \underline{b} \qquad (59)$$

por un procedimiento similar al anterior se llega a que:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{\|\delta \underline{x}\|}{\|\underline{x}^* + \delta \underline{x}\|} \leq K(\underline{\underline{A}}) \frac{\|\delta \underline{\underline{A}}\|}{\|\underline{\underline{A}}\|} \tag{60}$$

con igual connotación que en Ecuación (57). Los efectos del valor $\|\delta \mathbf{A}\|$ pueden subsanarse, en parte, trabajando con mayor precisión (mayor retención de cifras significativas durante el cálculo).

Refinamiento iterativo

Hemos visto que:

$$\underline{r} = \underline{b} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}_c$$

En las situaciones que nos interesa una solución muy cercana a la verdadera $\boldsymbol{x^* = A^{-1} . b}$, con un vector tal que **r** sea pequeño o, en caso en que $\boldsymbol{x_c}$ sea tal que:

$$\underline{e} = \underline{x}^* - \underline{x}_c \tag{61}$$

y sea muy pequeño en términos relativos a $\boldsymbol{x^*}$. Si:

$$\underline{b} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}^*$$

Resulta:

$$\underline{r} = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}^* - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}_c = \underline{\underline{A}} \cdot (\underline{x}^* - \underline{x}_c) = \underline{\underline{A}} \cdot \underline{e} \tag{62}$$

Tomando normas, y procediendo como ya se ha visto, se puede probar que:

$$\frac{1}{K(\underline{\underline{A}})} \frac{\|\underline{r}\|}{\|\underline{b}\|} \leq \frac{\|\underline{e}\|}{\|\underline{x}^*\|} \leq K(\underline{\underline{A}}) \frac{\|\underline{r}\|}{\|\underline{b}\|} \tag{63}$$

Por lo que, si el número de condición *K(**A**)* es cercano a la unidad, pequeños errores relativos de ***r*** y ***e*** siguen la misma tendencia (en coincidencia). Este hecho no ocurre para sistemas mal condicionados, como se había anticipado.

La respuesta al problema dependerá de la condición de ***A*** y de la precisión de la aritmética (redondeo). Esto lleva a que el cómputo del residuo ***r*** debe hacerse con doble precisión, por la razón de que ***r*** suele ser del mismo orden de magnitud que el error de redondeo.

Formalizar un procedimiento que contemple el problema es lo que se denomina *refinamiento iterativo*. En realidad se arma un esquema iterativo con una solución computada previamente, tal que el residuo para una etapa *m* de cálculo sea:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{r}^{(m)} = \underline{b} - \underline{\underline{A}} \cdot \underline{x}^{(m)} \; ; \; m = 1, 2, ..., \tag{64}$$

y de acuerdo a la Ecuación (61)

$$\underline{x}^{(m+1)} = \underline{x}^{(m)} + \underline{e}^{(m)} \tag{65}$$

con $\boldsymbol{e}^{(m)}$ calculada según la ecuación anterior.

Si $\boldsymbol{x}^{(m+1)}$ no es satisfactorio se procede a la etapa *(m+1)* de cálculo. En cambio, si $\|\boldsymbol{e}^{(m+1)}\| / \|\boldsymbol{e}^{(m)}\|$ es menor que una tolerancia establecida aceptamos la solución $\boldsymbol{x}^{(m)}$. Así, se conforma un criterio de terminación que funciona muy bien en la práctica.

Cada etapa de este proceso, además, es mucho más rápida que la solución del problema original. Se debe recordar que la computación de Ecuación (64) se realiza en doble precisión, lo que implica aumento en el requerimiento de memoria.

III.4.3 Métodos Iterativos

Su basamento es idéntico al método de aproximaciones sucesivas visto en el caso de funciones no lineales, con lo que empezando con un vector inicial se genera una sucesión de vectores, tal que:

$$\underline{x}_{i+1} = \underline{F}_i \, [\underline{x}_i, \underline{x}_{i-1}, ..., \underline{x}_{i-k}] \tag{66}$$

Si la F_i (función iteradora) no es dependiente sobre i (nivel de iteración) se llama, a la recurrencia, estacionaria.

Para la mayoría de las matrices estos métodos requieren más computación, para un deseado grado de convergencia, que los métodos directos; pero para la matrices ralas (de gran interés en aplicaciones) el esfuerzo computacional es comparable. Además, como hemos mencionado, para estas matrices es posible lograr una mejor utilización de la memoria. Luego para matrices ralas grandes, los métodos iterativos son los mas aconsejados por su eficiencia computacional.

Sólo nos interesarán *procesos iterativos lineales* por consideraciones de eficacia, una vez más. Un procedimiento de iteración *matricial lineal en un punto* tiene la forma general.

$$\underline{x}_{i+1} = \underline{\underline{B}}_i \cdot \underline{x}_i + \underline{c}_i \tag{67}$$

dónde $\boldsymbol{B}_i$ y $\boldsymbol{c}_i$ son independientes de *i* (iteración estacionaria).

Recordar que en los métodos iterativos basados en substitución directa (o Wegstein) debe explicitarse la variable independiente. A modo de introducción se puede ver dicha forma haciendo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$$

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} + \underline{x} = \underline{b} + \underline{x}$$

$$(\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{x} = \underline{x} + \underline{b}$$

$$\underline{x} = (\underline{\underline{A}} + \underline{\underline{I}}) \cdot \underline{x} - \underline{b}$$

o, en la ley de recurrencia:

$$\underline{x}_{i+1} = (\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{A}}) \cdot \underline{x}_i - \underline{b} \qquad (68)$$

que nos da una forma genérica simple de los métodos iterativos estacionarios que son los universalmente usados.

Método de Jacobi
Se escribe la matriz ***A*** como:

$$\underline{\underline{A}} = \underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{U}} \qquad (69)$$

siendo ***D*** la matriz diagonal (formada precisamente con esos elementos). ***L*** y ***U*** son triangulares inferior y superior, respectivamente, con el resto de los elementos; y ceros en su diagonal principal. Luego, si:

$$\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$$

$$(\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}} + \underline{\underline{U}}) \cdot \underline{x} = \underline{b}$$

$$\underline{\underline{D}} \cdot \underline{x} = -(\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{U}}) \cdot \underline{x} + \underline{b}$$

obtenemos:

$$\underline{x}_{i+1} = -\underline{\underline{D}}^{-1} \cdot (\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{U}}) \cdot \underline{x}_i + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{b} \qquad (70)$$

por supuesto que supone que la diagonal principal no tiene todos ceros (en ***A***).

De no ser así, si ***A*** es no singular, se debe permutar filas y columnas para obtener una forma que permita definir ***D***. Es deseable que sea de la forma diagonal dominante, esto que los elementos de la diagonal sean lo más grandes posibles respecto a los demás. Para este método de Jacobi la matriz ***B*** puede entonces escribirse como:

$$\underline{\underline{B}} = - \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot (\underline{\underline{L}} + \underline{\underline{U}}) \qquad (71)$$

haciendo:

$$\underline{x}_{i+1} = \underline{\underline{B}} \cdot \underline{x}_i + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{b} \qquad (72)$$

Método de Gauss-Seidel

Este es el método ampliamente usado que siempre converge si converge Jacobi, (y aún en casos en que éste no converge); y en general lo hace más rápido, siendo su implementación más eficiente.

La diferencia fundamental es que a medida que es calculada cada componente de $\boldsymbol{x_{i+1}}$ es usada inmediatamente en la misma iteración. Al proceder de ese modo, la ecuación obtenida para Jacobi, resulta:

$$\underline{x}_{i+1} = - \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot (\underline{\underline{L}} \cdot \underline{x}_{i+1}) + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{\underline{U}} \cdot \underline{x}_i + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{b} \qquad (73)$$

reordenando y sacando factor común $\boldsymbol{x_{i+1}}$ se tiene:

$$(\underline{\underline{I}} + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{\underline{L}}) \cdot \underline{x}_{i+1} = - \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{\underline{U}} \cdot \underline{x}_i + \underline{\underline{D}}^{-1} \cdot \underline{b}$$

por lo que premultiplicando por ***D***, obtenemos:

$$(\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}}) \cdot \underline{x}_{i+1} = - \underline{\underline{U}} \cdot \underline{x}_i + \underline{b}$$

luego:

$$\underline{x}_{i+1} = - (\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}})^{-1} \cdot \underline{\underline{U}} \cdot \underline{x}_i + (\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}})^{-1} \cdot \underline{b} \qquad (74)$$

entonces será, tomando ***B*** para la expresión generalizada:

$$\underline{x}_{i+1} = + \underline{\underline{B}} \cdot \underline{x}_i + (\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}})^{-1} \cdot \underline{b} \qquad (75)$$

$$\underline{\underline{B}} = - (\underline{\underline{D}} + \underline{\underline{L}})^{-1} \cdot \underline{\underline{U}} \qquad (76)$$

Existe un teorema que prueba que: *Si una matriz es definida positiva, el procedimiento de Gauss-Seidel converge independientemente del vector inicial propuesto.*

Otro hecho importante es que los métodos matriciales iterativos convergen linealmente. Es natural pensar que el error de redondeo es mayor en un método

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

iterativo que en uno directo; sin embargo como siempre se usa la matriz de coeficientes original, el error por redondeo en que se incurre en un método iterativo es sólo aquel producido en la última iteración. En consecuencia, ambos tipos de métodos tienen un error equivalente, tan serio para unos como para otros.

El error de truncamiento, en el caso de los métodos iterativos, suele ser de un orden mayor de magnitud que el mencionado de redondeo. No obstante, dado que en los métodos iterativos se tiene un criterio de control de error, este es acotado convenientemente.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Sea la siguiente ecuación definida para $x > 0$:

$$x^2 - \ln(3x) + 1/9 = 0$$

Encontrar las raíces de la misma por los siguientes métodos:

a) Wegstein
b) Newton-Raphson

P2) Para el flujo isoentrópico de un gas perfecto que fluye desde un reservorio a través de una boquilla convergente - divergente operando con velocidad sónica en la constricción, se puede demostrar que:

$$\frac{A_c^2}{A^2} = \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{(\gamma + 1)/(\gamma - 1)} \left(\frac{\gamma - 1}{2}\right) \left[\left(\frac{P}{P_r}\right)^{2/\gamma} - \left(\frac{P}{P_r}\right)^{(\gamma + 1)/\gamma}\right]$$

donde P es la presión sobre el área transversal A de la boquilla, P_r es la presión en el reservorio, A_c es la sección transversal en la constricción y γ es la relación entre el calor específico a presión constante y el calor específico a volumen constante.

Si A_c, γ, P_r y A ($> A_c$) se conocen, idear un esquema para calcular las *dos posibles presiones P* que satisfacen la ecuación de arriba. Implemente su método en la computadora.

Datos sugeridos para prueba:
$A_c = 0.1$ *pie*^{2}, $\gamma = 1.41$, $P_r = 100$ *psia* y $A = 0.12$ *pie*^{2}.

P3) Una bolsa esférica de gas a alta presión, inicialmente de radio r_0 y presión p_0, se expande radialmente en una explosión submarina adiabática. Para el caso especial de un gas con $\gamma = 4/3$ (relación de calor específico a presión constante a calor específico a volumen constante), el radio r en cualquier instante de tiempo t posterior a la explosión se expresa como:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{t}{r_0}\sqrt{\frac{p_0}{\rho}} = \left(1 + \frac{2}{3} + \alpha + \frac{1}{5}\alpha^2\right)(2\ \alpha)^{1/2}$$

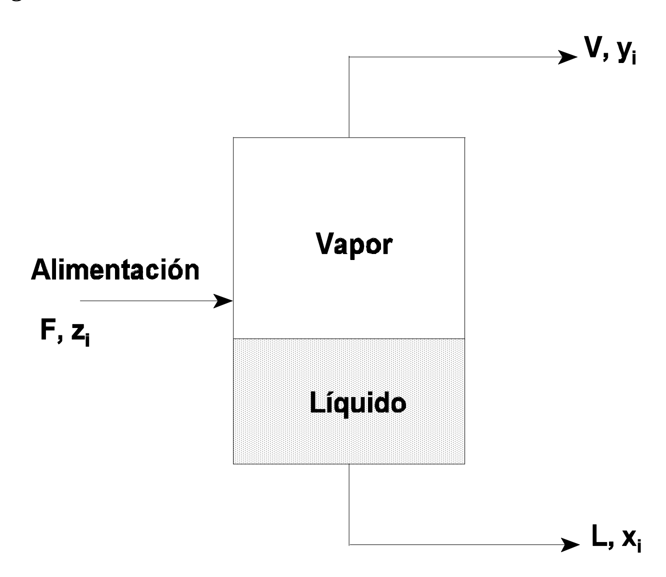
donde $\alpha = (r/r_0) - 1$ y ρ es la densidad del agua. Durante la expansión adiabática, la presión del gas se expresa como $(p/p_0) = (r_0/r)^{\gamma}$.

Desarrollar un procedimiento para calcular la presión y el radio de la bolsa para cualquier instante de tiempo.

Datos sugeridos para prueba:

$p_0 = 10^4\ lb_f/\ pulgada^2$, $\rho = 64\ lb_m\ /\ pie^3$, $r_0 = 1$ *pie, t = 0.5, 1, 2, 3, 5 y 10 milisegundos.*

P4) *F moles/hr.* de una corriente de gas natural licuado de *n-componentes* se introduce como corriente de alimentación a un tanque de vaporización flash como se indica en la figura siguiente:



Las corrientes resultantes de vapor y de líquido se extraen a las velocidades de *V* y *L* moles/hr., respectivamente. Las fracciones molares de los componentes en la alimentación, en el vapor y en el líquido, se designan, z_i, y_i, e x_i, respectivamente ($i = 1, 2, ..., n$). Suponiendo equilibrio líquido/vapor y operación en estado estacionario (en el capítulo IX desarrollaremos con mayor extensión el análisis de este equipo),

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tenemos:

Balance de materia: $F = L + V$

Balance individual: $z_i F = x_i L + y_i V$

Relación de equilibrio: $K_i = y_i/x_i$

Aquí, K_i, es la constante de equilibrio para la i-ésima componente a la temperatura y presión prevalecientes en el tanque. A partir de estas ecuaciones y del hecho que:

$$\sum_{i=1}^{n} x_i = \sum_{i=1}^{n} y_i = 1$$

probar que:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{z_i (K_i - 1)}{\Theta (K_i - 1) + 1} = 0$$

donde $\Theta = V/F$ representa la fracción vaporizada.

Escriba un programa que lea los valores de F, z_i, y los K_i como datos y entonces utilice el método de Newton para resolver esta última ecuación en Θ. El programa debería también calcular la fracción de líquido L/F, los x_i e y_i utilizando las tres primeras ecuaciones dadas más arriba. Los datos de prueba, que se muestran en la tabla siguiente, están relacionados con el flasheo de una corriente de gas natural a 1600 psia y 120 ºF.

Componente	**i**	z_i	K_i
Dióxido de carbono	1	0.0046	1.650
Metano	2	0.8345	3.090
Etano	3	0.0381	0.720
Propano	4	0.0163	0.390
Isobutano	5	0.0050	0.210
n-Butano	6	0.0074	0.175
Pentanos	7	0.0287	0.093
Hexanos	8	0.0220	0.065
Heptanos	9	0.0434	0.036
	Total	1.0000	

Suponer que $F = 1000$ *moles/hr.* Además deberían ser leídos como datos la tolerancia

ε y un número máximo de iteraciones. ¿Cuál sería un buen valor de arranque para Θ_i?.

P5) Para el flujo turbulento de un fluido a través de un tubo liso, es posible establecer la siguiente relación entre el factor de fricción c_f y el número de Reynolds *Re*:

$$\sqrt{\frac{1}{c_f}} = -0.4 + 1.74 \ln\left(Re\sqrt{c_f}\right)$$

Calcular c_f para Re = 10^4, 10^5 y 10^6.

P6) Para el flujo estacionario de un fluido incompresible a través de un tubo rugoso de longitud *L* y diámetro interior *D*, la caída de presión viene expresada por la siguiente relación:

$$\Delta p = \frac{f_M\, \rho\, u_M^2\, L}{2\, D}$$

donde ρ es la densidad del fluido, u_m es la velocidad media del fluido y f_M es el factor de fricción de Moody (adimensional). El factor de fricción de Moody es una función de la rugosidad ϵ y del número de Reynolds,

$$Re = \frac{D\, \rho\, u_M}{\mu}$$

donde μ es la viscosidad del fluido. Para $Re \leq 2000$,

$$f_M = \frac{64}{Re}$$

mientras que para $Re > 2000$, f_M viene expresada por la Ecuación de Colebrook,

$$\sqrt{\frac{1}{f_M}} = -2 * \log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{3.7\, D} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f_M}}\right)$$

Un buen punto de arranque para la solución iterativa de esta ecuación puede encontrarse a partir de la Ecuación de Blasius,

$$f_M = 0.316\, Re^{-0.25}$$

apropiada para flujo turbulento en tubos lisos.

Escribir una función (function), *PDELTA*, que podría ser llamada a través de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la sentencia: *DELTAP = PDELTA (Q, D, L, RHO, MU, E)* donde el valor de *PDELTA* representa la caída de presión para el flujo volumétrico (caudal) *Q* de un fluido con densidad *RHO* y viscosidad *MU* a través de un tubo de longitud *L*, diámetro interior *D* y rugosidad *E*. Observe que *MU* y *L deben* definirse como variables reales.

Escriba un programa que lea los valores de *Q*, *D*, *L*, *RHO*, *MU* y *E*, llame a *PDELTA* para calcular la caída de presión, imprima los datos y resultados y vuelva a leer otro conjunto de datos.

Datos sugeridos para prueba:

Q	gal/min	170	4
D	pulgada	3.068	0.622
L	pie	10000	100
RHO	lb_m/pie^3	62.4	80.2
MU	lb_m/pie seg.	0.0007	0.05
E	pulgada	0.002	0.0005

P7) Sea el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} 9x_1 + 3x_2 + 5x_3 &= -3 \\ 2x_2 - x_3 &= 0 \\ 4x_1 - 3x_2 + 7x_3 &= -1 \end{aligned}$$

Encontrar la solución por los siguientes métodos:

a) Gauss
b) Jacobi
c) Gauss-Seidel
d) Sustitución directa
e) Wegstein

P8) Sea el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} 9x_1 + 2x_2 &= 3 \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 &= 4 \\ 5x_2 + 4x_3 + 8x_4 &= -8 \\ 3x_3 - x_4 &= 0 \end{aligned}$$

Encontrar la solución mediante el método de Gauss. ¿Puede aprovechar la estructura particular del sistema para facilitar el cálculo?.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P9) Sea el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} 2\,x + 3\,y - z &= 0 \\ 4\,x - 3\,y - 9\,z &= 2 \\ 3\,x - 3\,y - z &= 1/3 \end{aligned}$$

Aplicar el método de Gauss-Seidel para encontrar la solución.

P10) Sea el siguiente sistema expresado en forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 2 & 4 & 3 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Encontrar los valores para Δx_1, Δx_2 y Δx_3 por los siguientes métodos:

a) Gauss
b) Gauss-Seidel
c) Jacobi

P11) Confeccionar un diagrama de flujos para un programa que ingrese como datos la matriz de coeficientes y el término independiente de un sistema de ecuaciones lineales de dimensión *N*, y calcule la solución. Suponer que dispone de subrutinas de inversión de matrices.

P12) Utilizando software comercial (rutinas IMSL, Numerical Recipes, etc.) confeccionar el programa correspondiente al diagrama de flujos anterior.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Carnahan, B., H. A. Luther y J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1969).
- Cohen, A. M., J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans y E. Stuart, *Análisis Numérico*, Editorial Reverté S. A., Barcelona (1977).
- Hamming, R. W., *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill, New York (1962).
- Hildebrand, F. B., *Introduction to Numerical Analysis*, McGraw-Hill, New York (1956).
- Hornbeck, R. W., *Numerical Methods*, Quantum Publishers, Inc., New York.
- Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, McGraw-Hill, New York (1962).

- Luthe, R., A. Olivera y F. Schutz, *Métodos Numéricos*, Editorial Limusa, México (1978).
- Milne, W. E., *Numerical Solution of Differential Equations*, John Wiley and Sons, New York (1953).
- O'Neill, P. V., *Advanced Engineering Mathematics*, 3ra. Ed., Wadsworth, Inc., USA (1991).
- Perry, J. H., *Chemical Engineers Handbook*, McGraw-Hill, New York.
- Ralston, A. y P. Rabinowitz, *First Course in Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., USA (1978).

CAPÍTULO IV

SISTEMAS DE ECUACIONES DE GRAN DIMENSIÓN Y POCO DENSOS

Por
Nicolás José Scenna

IV.1 INTRODUCCIÓN

En general, el modelo de una planta completa contiene miles de ecuaciones e incógnitas. Más aún, un problema de diseño involucra un número significativamente mayor de incógnitas que de ecuaciones, siendo su diferencia los grados de libertad que deben especificarse para definir un sistema compatible (igual número de incógnitas que de ecuaciones). Existen numerosas alternativas para realizar esta asignación. Como se verá más adelante, necesitamos algoritmos prácticos que nos permitan realizar la tarea, más aún si lo debemos hacer computacionalmente (algorítmicamente). Por otra parte, dado que deben manejarse miles de ecuaciones, es la única forma de realizarlo.

Es por ello que necesitamos herramientas numéricas para resolver sistemas de ecuaciones no lineales de gran dimensión, que sean lo suficientemente eficientes como para resolverlas rápidamente y sin problemas de almacenamiento en memoria. Este problema es típico tanto en simulación estacionaria como dinámica.

Dentro de este contexto, en las primeras secciones analizaremos métodos numéricos apropiados para sistemas de ecuaciones no lineales, que por otra parte son una continuación de los vistos en el capítulo anterior. En la segunda parte de este capítulo, se estudiarán métodos apropiados para resolver grandes sistemas de ecuaciones tomando ventaja de su estructura particular. Además, dado que un simulador se basa en programar un modelo para la planta a simular y dado que éste está constituido por un sistema de ecuaciones, es lógico establecer una correspondencia entre el tratamiento de un sistema de ecuaciones y su relación con los simuladores específicos. En la segunda parte de este capítulo se harán evidentes estas íntimas relaciones. En efecto, si realizamos un cambio gradual en el lenguaje, podremos abordar al sistema, no solamente como un conjunto de símbolos matemáticos, sino como la representación de la planta a simular.

IV.2 RESOLUCIÓN NUMÉRICA DE SISTEMAS DE ECUACIONES NO LINEALES

En el capítulo anterior se han visto técnicas que permiten la solución numérica de sistemas de ecuaciones lineales y además se analizaron métodos para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

resolver ecuaciones no lineales, que pueden generalizarse para aplicarlos a sistemas de ecuaciones no lineales. Dado que muchos de los métodos más importantes (cuadráticos) recurren a la linealización (proponiendo una secuencia de problemas lineales), nos serán muy útiles las metodologías ya vistas para sistemas de ecuaciones lineales.

La gran mayoría de los modelos correspondientes a procesos químicos involucran sistemas de ecuaciones no lineales; por lo tanto resulta imprescindible desarrollar métodos eficientes, tanto desde el punto de vista de la convergencia, como del tiempo de cómputo involucrado. Existen en la bibliografía un gran número de algoritmos destinados a la solución numérica de sistemas de ecuaciones no lineales. Aquí analizaremos unos pocos, los más utilizados en la práctica. Nuevamente, al igual que lo hicimos en el capítulo anterior, se darán las pautas mínimas para lograr comprender los basamentos conceptuales y poder aplicar los principales algoritmos para resolver problemas específicos. No se revisarán los teoremas que sustentan los principios utilizados, así como la demostración del orden de convergencia y las condiciones para las cuales éstos convergen.

El lector interesado en estos temas, al igual que en complementar los conocimientos aquí incorporados, deberá recurrir a la bibliografía recomendada al final del capítulo.

IV.2.1 Métodos de Newton-Raphson. Linealización

Sea un sistema de ecuaciones no lineales $\underline{f}\,(\underline{x}) = 0$. Si se procede a la expansión en serie de Taylor de la función $\underline{f}\,(\underline{x})$ alrededor del punto $\underline{x}^* \;/\; \underline{f}\,(\underline{x}^*) = 0$ tenemos:

$$f_i(\underline{x}) = f_i(\underline{x}^*) + \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) (\underline{x} - \underline{x}^*) + \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_j^2}\right) (\underline{x} - \underline{x}^*)^2 + \ldots + \qquad (1)$$

$$i = 1, \ldots, N \;;\; j = 1, \ldots, N = \textit{dimensión del sistema}$$

donde los términos entre paréntesis representan matrices. A la matriz que contiene a las primeras derivadas se la conoce como matriz Jacobiana,

$$\underline{\underline{J}} = \left(\frac{\partial f_i}{\partial x_j}\right) \; con \; i = 1, \ldots, N \;;\; j = 1, \ldots, N \qquad (2)$$

y es una matriz cuadrada de orden N que contiene la derivada de todas y cada una de las funciones f_i, respecto de todas y cada una de las variables x_j.

Si $\underline{x}'$ es la aproximación de la raíz $\underline{f}\,(\underline{x}^*) = 0$, una aproximación lineal de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

dicha función, $\underline{L}$ ($\underline{x}$), puede escribirse:

$$\underline{L}(\underline{x}') \cong \underline{f}(\underline{x}^*) + \underline{\underline{J}} \cdot (\underline{x}' - \underline{x}^*) = 0$$

O bien:

$$\underline{x}' = \underline{x}^* - \underline{\underline{J}}^{-1} \cdot \underline{f}(\underline{x}^*) \qquad (3)$$

Luego, cualquier $\underline{x}'$ en la iteración k se obtiene aplicando la ecuación anterior; con lo cual nos queda para las sucesivas aproximaciones a la raíz $\underline{x}^*$,

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^k - \underline{\underline{J}}^{-1} \cdot \underline{f}(\underline{x}^k) \qquad (4)$$

El Jacobiano debe evaluarse en $\underline{x} = \underline{x}^k$ y el exponente negativo indica inversión de la matriz.

La interpretación de esta ecuación ya la vimos en el Capítulo III, que para una variable implica la recta tangente a la función $f(x)$ *en* x^k, tomada como aproximación lineal de la verdadera función. Aquí el concepto es el mismo, pero ahora es un hiperplano el que aproxima la función en el punto $\underline{x}^k$. Este método es conocido como método de Newton-Raphson. Luego, en cada iteración, según la Ecuación (4), debe calcularse el Jacobiano $\underline{\underline{J}}$ y la matriz inversa $\underline{\underline{J}}^{-1}$, para luego proceder a la multiplicación indicada $\underline{\underline{J}}^{-1}$. $\underline{f}(\underline{x})$, que siendo entre una matriz de ($N \times N$) y un vector de ($N \times 1$) resulta un vector ($N \times 1$) que debe sustraerse del vector $\underline{x}^k$ para darnos $\underline{x}^{k+1}$.

Otra forma de proceder es escribir el Sistema (4) de la siguiente forma:

$$\underline{\underline{J}} \cdot \underline{\Delta x}^k = -\underline{f}(\underline{x}^k) \qquad (5)$$

Aquí, dado que $\underline{\underline{J}}$ y f son conocidos, tenemos un sistema de ecuaciones con $\underline{\underline{J}}$ como matriz de coeficientes, f como términos independientes y $\underline{\Delta x}^k$ como vector incógnita.

Si bien desde el punto de vista analítico ambas expresiones son equivalentes, desde el punto de vista numérico o procedural no lo son. En efecto, es conveniente utilizar una u otra según sea el sistema a resolver y como veremos más adelante, uno de los factores más importantes es la estructura del sistema de ecuaciones, o lo que es lo mismo, de la matriz de coeficientes $\underline{\underline{J}}$.

El Sistema (4) impone la inversión numérica de una matriz, para lo cual existen varios algoritmos, los cuales serán más o menos convenientes según las características de $\underline{\underline{J}}$. En cambio, para resolver el Sistema (5) pueden utilizarse los procedimientos de manipulación de matrices (Gauss, etc.) vistos en el capítulo anterior. En general, en la mayoría de los problemas utilizaremos una variante del

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

método de eliminación Gaussiana.

Debe remarcarse que este procedimiento de resolución del sistema de ecuaciones lineales debe realizarse para cada iteración *k*, hasta lograr convergencia y en sistemas donde, por ejemplo, *N* es mayor que *1000*, exige un importante consumo de tiempo y memoria (almacenamiento). Luego, todos los aspectos discutidos en el capítulo anterior respecto de estos puntos adquieren superlativa importancia. Más adelante veremos dos ejemplos en los cuales se mostrará cómo puede facilitarse enormemente el cómputo de los vectores $\underline{\Delta x}^k$ en función de la estructura particular de $\underline{\underline{J}}$.

Una característica que debemos recordar sobre el método de Newton-Raphson (N-R) es que si no inicializamos en un punto próximo a la solución, puede no converger; además, en general, se hace más lento a medida que avanza a la solución, pese a que el esfuerzo de evaluar los Jacobianos, iteración a iteración, es el mismo.

Por último, a medida que el determinante de $\underline{\underline{J}}$ tiende a cero, los valores de los incrementos $\underline{\Delta x}^k$ pueden ser muy grandes, es decir, fuera de *escala*. Para resolver o mitigar estos problemas se han propuesto muchas variantes, algunas con sustento teórico y otras con basamento empírico, con conocimiento provisto por la experiencia. Acerca de algunos procedimientos que eviten problemas como los mencionados arriba podemos citar un adecuado escalado de todos los coeficientes de la matriz $\underline{\underline{J}}$ (esto evita errores de redondeo o truncamiento), mediante la división por constantes de las filas de la matriz y el uso del Jacobiano un cierto número de veces (mantener la pendiente un cierto número de iteraciones), lo cual hace que el método ya no sea estrictamente de orden dos pero evita el tiempo de cómputo del Jacobiano. Esta estrategia da mejores resultados cuando estamos próximos a la convergencia.

Por otra parte, también resulta útil acotar por un cierto parámetro $\alpha \subset [0,1]$ los incrementos calculados $\underline{\Delta x}^k$, de tal forma de evitar el *disparo* de los incrementos en las variables independientes. Otra técnica consiste en acotar cada componente de $\underline{\Delta x}^k$ pero esto sólo es posible cuando la aplicación física permite inferir ciertas propiedades. Por ejemplo, en una columna de destilación todos los incrementos de temperatura ΔT_i pueden acotarse a 10°C en cada iteración. Además, si las correcciones hacen que el valor corregido (en grados Kelvin) sea negativo, se aplicará un factor de reducción mayor al incremento de tal forma de lograr una temperatura positiva. Un criterio más profundo, y además complementario, es plantear un problema de optimización, de tal forma de encontrar un factor de escala α, que si bien mantiene la dirección del incremento $\underline{\Delta x}^k$, modifica la norma del vector $\underline{\Delta x}^k$ según el siguiente criterio.

$$\underset{\alpha}{Min} \; || \; \underline{f} \; (\underline{x}^k + \alpha \; \underline{\Delta x}^k) \; || \qquad (6)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Esto es, lograr el factor de escalado α que permita el máximo descenso posible (tiende a cero) de la función $f(\alpha)$. Esto si bien favorece la velocidad de convergencia, impone resolver un problema de optimización. Aunque sea de una sola variable, α, éste debe resolverse en cada iteración. Otro método propuesto para acelerar la convergencia, modificando al de N-R, es el de Broyden, que es muy utilizado en simulación de procesos, como se verá en el Capítulo (X). El método de Broyden (1965) forma parte de una familia de métodos conocidos como cuasi-Newtonianos, en los cuales se reemplaza la matriz Jacobiana por una aproximación que es adaptada en cada iteración (de esta manera se ahorra tiempo de cómputo).

$$\underline{x}^{k+1} = \underline{x}^{k} - t^{k} \, (\underline{\underline{B}}^{-1})^{k} \, . \, \underline{f} \, (\underline{x}^{k}) \tag{7}$$

donde t^k es un factor de escalado y $\underline{\underline{B}}$ es la aproximación de $\underline{\underline{J}}$. El factor t^k se calcula de tal manera que $\underline{f} \, (\underline{x}^k + t^k \, \underline{\Delta x}^k)$ resulte mínimo (similar a la variable α en la Ecuación (6)). La matriz $\underline{\underline{B}}$ se calcula en función del parámetro t^k y las correcciones $\underline{\Delta x}^k$ existiendo varias estrategias propuestas. Para un análisis más profundo se remite al lector a la bibliografía recomendada.

Ejemplo:
Sea la ecuación:

$$3 \ln(x) - x + \frac{1}{x} = 0$$

definida para x > 0. Hallar una raíz por el método de N-R.

Proponemos $x_0 = 0.1$ y tomamos como criterio de error o tolerancia $|f(x)| < 10^{-3}$.

Según hemos visto, proceder de acuerdo al procedimiento iterativo N-R implica suponer un valor inicial o semilla considerado como una aproximación a la solución (raíz) buscada. El criterio de error lo necesitamos ya que la serie de valores consecutivos que genera el método debe, si es convergente hacia la solución, detenerse en algún momento, esto es, numéricamente debemos decidir cuán cerca de la solución (tolerancia o error aceptable) queremos llegar.

Con el valor inicial supuesto y el criterio de error ya podemos comenzar con la generación de los sucesivos valores (aproximaciones) a la raíz buscada. Para ello es conveniente derivar la función, a los efectos de calcular fácilmente la derivada en cada iteración.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$f\ (0.1) = 3\ \ln\ (0.1) + 10 - 0.1 = 2.99224$

$f\ (x_0) \neq 0$, *luego*:

$$x_1 = x_0 - \frac{f\ (x_0)}{f^{/}\ (x_0)}$$

$$f^{/}\ (x) = \frac{3}{x} - 1 - \frac{1}{x^2}$$

$$f^{/}\ (x_0) = 30 - 1 - 100 = -71$$

$$x_1 = 0.1 - \frac{2.99224}{(-71)} = 0.142144$$

$f\ (x_1) = 1.04023 \neq 0$, *luego* :

$$x_2 = x_1 - \frac{f\ (x_1)}{f^{/}\ (x_1)} = 0.142144 - \frac{1.04023}{-29.3875} = 0.177541$$

$f\ (x_2) = 0.26930 \neq 0$, *luego*:

$$x_3 = x_2 - \frac{f\ (x_2)}{f^{/}\ (x_2)} = 0.177541 - \frac{0.26930}{(-15.8383)} = 0.194544$$

$f\ (x_3) = 0.03439 \neq 0$, *luego*:

$$x_4 = x_3 - \frac{f\ (x_3)}{f^{/}\ (x_3)} = 0.194544 - \frac{0.03439}{(-12.0012)} = 0.19741$$

$$f\ (x_4) = 7.720\ 10^{-4} < 10^{-3}$$

Luego, $x = 0.19741$ es una de las raíces dentro del criterio de tolerancia establecido.Puede observarse que el valor $x = 1$ también es solución. El lector puede verificar intentando el proceso con una nueva inicialización.

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$x_1^2 - x_2^2 = 0$$

$$2\ x_1 - 2 = 0$$

Hallar una raíz aplicando el método de N-R. Para ello suponemos $\underline{x}^0$ = (1,2),

$$J = \begin{vmatrix} f'_{11} & f'_{12} \\ f'_{21} & f'_{22} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 2x_1 & -2x_2 \\ 2 & 0 \end{vmatrix}$$

$$f_1\ (\underline{x}^0) = -3$$

$$f_2\ (\underline{x}^0) = 0$$

Luego, debemos calcular $\underline{\Delta x}^1$. Resolvemos el siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} 2 & -4 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^1 \\ \Delta x_2^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +3 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$2\ \Delta x_1^1 - 4\ \Delta x_2^1 = 3$$

$$2\ \Delta x_1^1 = 0 \Rightarrow \Delta x_1^1 = 0\ ,\ \Delta x_2^1 = -0.75\ ,\ \textit{luego}:$$

$$x_1^1 = 1 + 0 = 1$$

$$x_2^1 = 2 - 0.75 = 1.25$$

$$f_1\ (\underline{x}^1) = 1 - (1.25)^2 = -0.5625$$

$$f_2\ (\underline{x}^1) = 2 - 2 = 0$$

Luego, para el cálculo de $\underline{\Delta x}^2$ resolvemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{bmatrix} 2 & -2.50 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^{2} \\ \Delta x_2^{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5625 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$2\ \Delta x_1^2 - 2.50\ \Delta x_2^2 = 0.5625$

$2\ \Delta x_1^2 = 0 \Rightarrow \Delta x_1^2 = 0\ ,\ \Delta x_2^2 = 0.5625/(-2.50) = -0.225$

$x_1^2 = x_1^1 + \Delta x_1^2 = 1$

$x_2^2 = x_2^1 + \Delta x_2^2 = 1.25 - 0.225 = 1.025$

$f_1(\underline{x}^2) = 1 - (1.025)^2 = -\ 0.050625$

$f_2(\underline{x}^2) = 2 - 2 = 0$

$\|\underline{f}(\underline{x}^2)\| > 10^{-3}$, luego resolvemos:

$$\begin{bmatrix} 2 & -2.05 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta x_1^{3} \\ \Delta x_2^{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.050625 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$-2\ \Delta x_1^3 - 2.05\ \Delta x_2^3 = 0.050625$

$2\ \Delta x_1^3 = 0 \Rightarrow \Delta x_1^3 = 0\ ,\ \Delta x_2^3 = -\ 0.02469$, *luego*:

$x_1^3 = 1$

$x_2^3 = 1.025 - 0.02469 = 1.000307$

$f_1\ (\underline{x}^3) = 1 - 1.00061 = -\ 6.14\ 10^{-4}$

$f_2\ (\underline{x}^3) = 0$

luego, $\|\ f\ (\underline{x}^3)\ \| < 10^{-3}$. Entonces, el vector (1, 1.000307) es solución del sistema dado. Nótese que las solución exacta es (1, 1).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

IV.2.2 Matrices Tridiagonales. Método de Thomas

Como anticipamos, existen sistemas de ecuaciones tales que por su estructura, permiten procedimientos especiales que ahorran tiempo de cómputo y permiten acotar o minimizar los errores. Sea el siguiente sistema de ecuaciones, que como se verá en el Capítulo X es muy importante en el modelado de equipos múltiple etapas en cascadas contracorriente, por ejemplo, columnas de destilación:

$$
\begin{array}{l}
a_{11}\,x_1 + a_{12}\,x_2 + 0 + 0 + 0 + \dots + 0 = d_1 \\
a_{21}\,x_1 + a_{22}\,x_2 + a_{23}\,x_3 + 0 + 0 + \dots + 0 = d_2 \\
0 + a_{32}\,x_2 + a_{33}\,x_3 + a_{34}\,x_4 + 0 + \dots + 0 = d_3 \\
\quad\vdots \\
0 + \dots\, a_{n-1,n-2}\,x_{n-2} + a_{n-1,n-1}\,x_{n-1} + a_{n-1,n}\,x_n = d_{n-1} \\
0 + \dots + a_{n,\,n-1}\,x_{n-1} + a_{n,n}\,x_n = d_n
\end{array} \tag{8}
$$

o en forma matricial compacta:

$$
\begin{bmatrix}
B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\
0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\
0 & . & . & 0 & . & . \\
0 & . & . & A_{n-1} & B_{n-1} & C_{n-1} \\
0 & 0 & 0 & 0 & A_n & B_n
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
\Delta x_1 \\ \Delta x_2 \\ \Delta x_3 \\ . \\ \Delta x_{n-1} \\ \Delta x_n
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ . \\ d_{n-1} \\ d_n
\end{bmatrix} \tag{9}
$$

que se denomina matriz tridiagonal, ocupando los coeficientes A_i, B_i y C_i los lugares antes, en la diagonal y posterior respectivamente. Es por ello que podemos obviar la notación de dos índices del Sistema (8) y escribirlo más sencillamente según el Sistema (9).

El Sistema de Ecuaciones (8) es un típico caso que involucra matrices ralas, esto es, poco densas y de muy elevada dimensión. En el Capítulo X veremos que ciertas aplicaciones normalmente involucran miles de ecuaciones. Luego, debe trabajarse eficientemente. Esto implica dos aspectos. El primero, evitar los errores de redondeo y eventualmente de truncamiento que se generan (si el procedimiento es inadecuado) y el segundo es el tiempo de cómputo.

Para ambos aspectos Thomas introduce un método eficiente, que se basa en la técnica de eliminación Gaussiana vista en el capítulo anterior, pero tomando

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ventaja de la estructura particular del sistema en análisis (tridiagonal). Para la primer fila ($n = 1$) tenemos:

$$B_1 \; x_1 \; + \; C_1 \; x_2 \; = \; D_1 \tag{10}$$

de donde:

$$x_1 \; = \; \frac{D_1 \; - \; C_1 \; x_2}{B_1} \tag{11}$$

Si se define $p_1 \; = \; C_1/B_1 \;\; y \;\; q_1 \; = \; D_1/B_1$, entonces la Ecuación (10) se escribe:

$$x_1 \; = \; q_1 \; - \; p_1 \; x_2 \tag{12}$$

Comparando la Ecuación (10) con la Ecuación (12) vemos que los coeficientes que acompañan a las incógnitas son ahora $B_1 \; = \; 1 \;\; y \;\; C_1 \; = \; p_1$ y el valor de D_1 es ahora q_1. Tomando en cuenta estos valores, y procediendo de igual manera para $n = 2$ tenemos:

$$x_2 \; = \; \frac{D_2 \; - \; A_2 \; q_1}{B_2 \; - \; A_2 \; p_1} \; - \; \left(\frac{c_2}{B_2 \; - \; A_2 \; p_1} \right) \; x_3$$

Si llamamos:

$$q_2 \; = \; \frac{D_2 \; - \; A_2 \; q_1}{B_2 \; - \; A_2 \; p_1}$$

$$p_2 \; = \; \frac{C_2}{B_2 \; - \; A_2 \; p_1}$$

Nos queda:

$$x_2 \; = \; q_2 \; - \; p_2 \; x_3 \tag{13}$$

Nuevamente los coeficientes ahora resultan $A_2 \; = \; 0, \;\; B_2 \; = \; 1, \;\; C_2 \; = \; p_2 \;\; y \;\; D_2 \; = \; q_2$. En general los valores p_n y q_n pueden obtenerse según la siguiente ley de recurrencia:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$p_n = \frac{C_n}{B_n - A_n\, p_{n-1}} \tag{14}$$

$$q_n = \frac{D_n - A_n\, q_{n-1}}{B_n - A_n\, p_{n-1}} \tag{15}$$

que conforman los coeficientes genéricos para:

$$x_n = q_n - p_n\, x_{n+1} \tag{16}$$

Las anteriores fórmulas permiten calcular p_n y q_n desde *1* a (*N*-*1*) y también q_N. Para la última fila tenemos, despejando de la ecuación anterior ($A_N = 0$):

$$x_N = \frac{D_N}{B_N} = q_N \tag{17}$$

Por lo tanto, luego de este proceso de *operaciones elementales* aplicadas a todas las filas, obtenemos de la última (*N*) el valor de x_N. Luego, a partir de x_N, por el proceso inverso, a partir de la Ecuación (16), obtenemos todos los x_n, desde $n = N - 1$, hasta *1*.

$$x_{n-1} = q_{n-1} - p_{n-1}\, x_n = r_{n-1} \tag{18}$$

Un ejemplo numérico para la matriz tridiagonal es el siguiente. El lector puede aplicar las fórmulas recursivas anteriores para lograr la solución del mismo.

$$\begin{bmatrix} 3 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 6 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

IV.2.3 Extensión del Método de Thomas a Matrices Tridiagonales en Bloque

Sea el siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} \underline{\underline{B}}_1 & \underline{\underline{C}}_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \underline{\underline{A}}_2 & \underline{\underline{B}}_2 & \underline{\underline{C}}_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \underline{\underline{A}}_3 & \underline{\underline{B}}_3 & \underline{\underline{C}}_3 & 0 & 0 \\ 0 & . & . & 0 & . & . \\ 0 & . & . & \underline{\underline{A}}_{n-1} & \underline{\underline{B}}_{n-1} & \underline{\underline{C}}_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \underline{\underline{A}}_n & \underline{\underline{B}}_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{X}_1 \\ \underline{X}_2 \\ \underline{X}_3 \\ . \\ \underline{X}_{n-1} \\ \underline{X}_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\underline{F}_1 \\ -\underline{F}_2 \\ -\underline{F}_3 \\ . \\ -\underline{F}_{n-1} \\ -\underline{F}_n \end{bmatrix} \qquad (19)$$

donde $\underline{\underline{A}}$, $\underline{\underline{B}}$ y $\underline{\underline{C}}$ son matrices de (m x m) y además $\underline{x}$ y $\underline{F}$ son vectores de dimensión m; se puede demostrar que puede operarse en forma similar al algoritmo de Thomas para resolver una matriz tridiagonal pero ahora con las submatrices y vectores en lugar de los escalares indicados en las Ecuaciones (14) a (18).

Genéricamente, podemos plantear que el rol de A_n, B_n, C_n, D_n y x_n ahora lo cumplen $\underline{\underline{A}}_n$, $\underline{\underline{B}}_n$, $\underline{\underline{C}}_n$, $-\underline{F}_n$ y $\underline{X}_n$, respectivamente. En efecto, aplicando el mismo razonamiento anterior, para la primer fila tenemos:

$$\underline{\underline{B}}_1 \underline{X}_1 + \underline{\underline{C}}_1 \underline{X}_2 = -\underline{F}_1$$

$$\underline{X}_1 = -\underline{\underline{B}}_1^{-1} (\underline{F}_1 - \underline{\underline{C}}_1 \underline{X}_2)$$

$$\underline{X}_1 = -\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{F}_1 - (\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{\underline{C}}_1) \underline{X}_2$$

reordenando tenemos:

$$\underline{X}_1 + (\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{\underline{C}}_1) \underline{X}_2 = -\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{F}_1$$

Luego, las nuevas constantes (matriz y vectores) asumen los siguientes reemplazos:

$$\underline{\underline{B}}_1 \leftarrow \underline{\underline{I}}$$

$$\underline{\underline{C}}_1 \leftarrow (\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{\underline{C}}_1)$$

$$\underline{F}_1 \leftarrow (\underline{\underline{B}}_1^{-1} \underline{F}_1)$$

donde $\underline{\underline{I}}$ es la matriz identidad.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Siguiendo el mismo razonamiento anterior y operando algebraicamente, para las filas *2* a *N-1*, tenemos para la transformación de las matrices de los coeficientes el siguiente reemplazo:

$$\underline{\underline{C}}_n \leftarrow (\underline{\underline{B}}_n - \underline{\underline{A}}_n \underline{\underline{C}}_{n-1})^{-1} \underline{\underline{C}}_n$$

$$\underline{F}_n \leftarrow (\underline{\underline{B}}_n - \underline{\underline{A}}_n \underline{\underline{C}}_{n-1})^{-1} (\underline{F}_n - \underline{\underline{A}}_n \underline{F}_{n-1}) \; ; \; \underline{\underline{A}}_n \leftarrow 0 \; , \; \underline{\underline{B}}_n \leftarrow \underline{\underline{I}}$$

Para la última fila, $\underline{\underline{B}}_n \leftarrow \underline{\underline{I}}$ y $\underline{\underline{A}}_N \leftarrow \underline{\underline{0}}$. Luego:

$$\underline{X}_N = - \underline{F}_N \qquad (20)$$

donde se procede al siguiente reemplazo (según las ecuaciones vistas arriba):

$$\underline{F}_N \leftarrow (\underline{\underline{B}}_N - \underline{\underline{A}}_N \underline{\underline{C}}_{N-1})^{-1} (\underline{F}_N - \underline{\underline{A}}_N \underline{F}_{N-1}) \qquad (21)$$

Obteniendo el valor del vector $\underline{X}_N$, al igual que en el caso anterior, por medio del camino inverso, calculamos los $\underline{X}_{N-1}, \ldots, \underline{X}_1$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} &\underline{X}_n = - (\underline{F}_n + \underline{\underline{C}}_n \underline{F}_{n+1}) \\ &con \; n = (N-1), (N-2), \ldots, 1 \end{aligned} \qquad (22)$$

y obtenemos la solución del sistema paso a paso.

Por ejemplo, el siguiente sistema de ecuaciones representando por una matriz de coeficientes de forma tridiagonal en bloques:

$$\begin{bmatrix} -7 & 3 & 4 & 2 & 11 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 3 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 9 & 3 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 4 & -6 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & -4 & 3 & 2 & 0 & -4 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 0 & 2 & 1 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 3 & 2 & 6 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \underline{X}_1 \\ \underline{X}_2 \\ \underline{X}_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

puede resolverse según el algoritmo planteado. Esto implica encontrar los valores del vector $(\underline{X}_1, \underline{X}_2, \underline{X}_3)$, con $\underline{X}_1 = (x_1, x_2, x_3)$, $\underline{X}_2 = (x_4 , x_5, x_6)$, y $\underline{X}_3 = (x_7, x_8, x_9)$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

IV.2.4 Método de Sustitución Directa o Aproximaciones Sucesivas

En el capítulo anterior vimos que para una ecuación no lineal de una incógnita, era posible, explicitando la variable independiente, generar una secuencia de valores tales que se llegara, si el método converge, a la solución (raíz) buscada.

También vimos que para acelerar la convergencia es posible introducir ciertas modificaciones en el procedimiento. Uno de los métodos estudiados fue el propuesto por Wegstein. Aquí veremos que estos métodos son directamente aplicables a sistemas de ecuaciones no lineales.

Sea el sistema:

$$\underline{f}\ (\underline{x}) = \underline{0}$$

Se explicita $\underline{x}$ tal que:

$$\underline{x} - \underline{F}\ (\underline{x}) = 0$$

esto es:

$$\underline{x} = \underline{F}\ (\underline{x})$$

Luego, el algoritmo de sustitución directa propone la siguiente secuencia:

$$\underline{x}^{\,n+1} = \underline{F}\ (\underline{x}^{\,n}) \qquad (23)$$

que converge si se cumple:

$$\| \ \underline{x}^{\,n+1} - \underline{x}^{\,n} \ \| \leq \varepsilon \qquad (24)$$

donde ε es una tolerancia especificada.

Se puede probar que si el determinante del Jacobiano de la función $\underline{F}\ (\underline{x})$ es menor que la unidad en la región de trabajo en el entorno del punto solución $\underline{x}^{*}/F\ (\underline{x}^{*}) = 0$, el método converge.

Aquí también se logra acelerar la velocidad de convergencia según el método de Wegstein. Para ello se procede de la misma forma indicada en la Sección (III.3). En efecto, la Ecuación (III.23) se escribe ahora:

$$\underline{\bar{x}}^{\,n} = \underline{\underline{Q}}\ \underline{\bar{x}}^{\,n-1} + (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{Q}})\ \underline{x}^{\,n} \qquad (25a)$$

$$\underline{x}^{\,n+1} = \underline{F}\ (\underline{\bar{x}}^{\,n}) \qquad (25b)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde los elementos de $\underline{\underline{Q}}$, $q_j^{\,i}$ se calculan en cada iteración *i* para cada componente *j = 1, ..., N* según:

$$q_j^{\,i} = \frac{w_j^{\,i}}{w_j^{\,i} - 1} \tag{26}$$

$$w_j^{\,i} = \frac{x_j^{\,i} - x_j^{\,i-1}}{\bar{x}_j^{\,i-1} - \bar{x}_j^{\,i-2}} \tag{27}$$

El factor de corrección $q_j^{\,i}$ debe calcularse para cada componente en cada iteración. Nuevamente, para el inicio el método se recurre al método convencional de sustitución directa:

$$Sea: \quad \underline{\bar{x}}^{\,1} = \underline{x}^{\,1} \;\; y \;\; \underline{\bar{x}}^{\,2} = \underline{x}^{\,2}$$

$$w_j^{\,3} = \frac{x_j^{\,3} - x_j^{\,2}}{x_j^{\,2} - x_j^{\,1}} \quad ; \quad j = 1, \ldots, N$$

$$\underline{\bar{x}}^{\,3} = \underline{\underline{Q}}\,\underline{\bar{x}}^{\,2} + (\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{Q}})\,\underline{x}^{\,3}$$

con

$$\underline{\underline{Q}} = \begin{bmatrix} \dfrac{x_1^{\,3} - x_1^{\,2}}{x_1^{\,3} - 2\,x_1^{\,2} + x_1^{1}} & 0 & 0 \;\ldots & 0 \\ 0 & \dfrac{x_2^{\,3} - x_2^{\,2}}{x_2^{\,3} - 2\,x_2^{\,2} + x_2^{1}} & 0 \;\ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots \;\; \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots \; 0 & \dfrac{x_N^{\,3} - x_N^{\,2}}{x_N^{\,3} - 2\,x_N^{\,2} + x_N^{1}} \end{bmatrix}$$

Para una iteración genérica, *k*,los nuevos valores de $\underline{x}$ se calculan de acuerdo con las Ecuaciones (25a) y (25b), teniendo en cuenta que los valores de la matriz $\underline{\underline{Q}}$, $q_j^{\,i}$, deben actualizarse en cada iteración según las Ecuaciones (26) y (27).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

$$x_1 \ln (x_2) - x_1 + x_1^{(x_2 - x_1)} = 0$$

$$x_1 \ln (3\ x_2) + x_2 - 1 = 0$$

con $x_2 \geq 0$, $x_1 \geq 0$. Resolverlo mediante el procedimiento de sustitución directa.

Solución:

Se comienza explicitando el vector $\underline{x} = (x_1,\ x_2) = \underline{F}\ (\underline{x})$

$$x_1 = x_1 \ln x_2 + x_1^{(x_2 - x_1)}$$

$$x_2 = 1 - x_1 \ln (3x_2)$$

Sea el vector inicial $\underline{x}^0$ (inicialización) = (0, 2), entonces $\underline{x}^1 = \underline{F}\ (\underline{x}^0)$.

$$x_1^1 = 0 + 0^2 = 0$$

$$x_2^1 = 1 - 0 = 1$$

Aquí vemos que $\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$, luego el vector (0,1) no es solución del sistema.

$$\underline{x}^2 = \underline{F}\ (\underline{x}^1)$$

$$x_1^2 = 0 + 0 = 0$$

$$x_2^2 = 1 - 0 = 1$$

Luego $\underline{x}^2 = \underline{x}^1$. Esto implica que $\underline{x} = (0,1)$ es solución del sistema de ecuaciones analizado. Si probamos con otro punto de arranque, (por ejemplo (0.5,0.5)), tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{x}^{1} = \underline{F}(\underline{x}^{0})$

$x_1^1 = 0.5 \ln(0.5) + 0.5 = 0.653426$

$x_2^1 = 1 - 0.5 \ln(1.5) = 0.797267$

$\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$, *luego calculamos* $\underline{x}^2 = F(\underline{x}^1)$

$x_1^2 = 0.653426$

$x_2^2 = 0.797267$

Luego, calculamos $\underline{x}^3$,

$x_1^3 = 0.653426 \ln(0.797267) + 0.653426^{(0.797267-0.653426)}) = 0.792584$

$x_2^3 = 1 - 0.653426 \ln(2.39180) = 0.430181$

$\underline{x}^3 \neq \underline{x}^2$, *luego*:

$x_1^4 = 0.792584 \ln(0.430181) = 0.792584^{(0.430181-0.792584)} = 0.419310$

$x_2^4 = 1 - 0.792584 \ln(1.290543) = 0.79784$

$x_1^5 = 0.419310 \ln(0.79784) + 0.41931^{(0.79784-0.419310)} = 0.624945$

$x_2^5 = 1 - 0.419310 \ln(2.39352) = 0.6340404$

Siendo las soluciones más aproximadas:

$x_1 = 0.68282645357897$

$x_2 = 0.59936582123074$

Que hacen que las funciones valgan:

$f_1(x_1,x_2) = 9*10^{-14} \quad f_1(x_1,x_2) = -1.1*10^{-13}$

Ejemplo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\bar{x}^3 = q\,\bar{x}^2 + (1 - q)\,x^3$$

Cálculo de q:

$$w = \frac{x^3 - x^2}{\bar{x}^2 - \bar{x}^1} = \frac{2.61505 - 2.27951}{2.27951 - 1.73205} = 0.612918$$

$$q = \frac{w}{w - 1} = -1.583434$$

$$\bar{x}_3 = (-1.583434)\ 2.27951 + (2.583434)\ (2.61505) = 3.14635$$

$$x^4 = F\,(\bar{x}^3) = 3.0723$$

$$\bar{x}^4 = q\,\bar{x}^3 + (1-q)\,x^4$$

$$w = \frac{x^4 - x^3}{\bar{x}^3 - \bar{x}^2} = \frac{3.0723 - 2.61505}{3.14635 - 2.27951} = 0.53274$$

$$q = \frac{w}{w - 1} = 1.1401$$

$$\bar{x}^4 = (-1.1401)\ (3.14635) + (2.1401)\ 3.0723 = 2.9878$$

$$x^5 = F\,(\bar{x}^4) = 2.99393$$

$| x^5 - \bar{x}^4 | = 0.0613 \neq 0$, *entonces*:

$$w = \frac{x^5 - x^4}{\bar{x}^4 - \bar{x}^3} = \frac{2.99393 - 3.0723}{2.9878 - 3.14635} = 0.5028$$

$$q = \frac{w}{w - 1} = -1.01137$$

$$\bar{x}^5 = (-1.01137)\ 2.9878 + (-2.01137)\ 2.99393 = 3.00011$$

$$x^6 = F\,(\bar{x}^5) = 3.000056$$

$$|x^6 - \bar{x}^5| < 10^{-3}$$

Luego, 3.000056 es raíz de la *f (x)* dada. De la misma manera, puede ejercitar al lector el procedimiento de Wegstein para el sistema del ejemplo anterior, teniendo en cuenta que al existir ahora dos variables, los factores *q* y *w* deben calcularse para cada una de ellas. Nótese que aquí se ha reducido sustancialmente el número de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

iteraciones respecto al método de sustitución directa, esto es, se ha *acelerado* el proceso de convergencia. Sin embargo, acelerar la convergencia no implica que si el método de sustitución directa no converge, sí lo hará el procedimiento de Wegstein.

IV.3 ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE SISTEMAS DE ELEVADA DIMENSIÓN

Resulta claro que los métodos numéricos discutidos en las secciones anteriores o en el Capítulo III son idóneos para la resolución de los sistemas que aquí discutimos. No obstante, en adelante nos centraremos en los aspectos estructurales y en el análisis de cómo tomar ventajas de la topología particular del sistema de ecuaciones, de tal manera de lograr un método de resolución eficiente.

Una estrategia adecuada para este tipo de problemas, según algunos de los ejemplos ya vistos, es particionarlo en subsistemas independientes, tales que al ser resueltos cada uno de ellos en un orden particular, permitan la solución global del sistema de ecuaciones dado. Recordemos que esta estrategia ya fue mencionada en los Capítulos I y II, para distintos tipos de problemas. Aquí veremos que nuevamente la representación matricial y por grafos resultará ventajosa para nuestros propósitos.

Una forma de modelar el sistema es plantear la representación del mismo mediante la llamada *matriz de ocurrencia o incidencia*, que por definición es un arreglo de n filas y n columnas (suponemos un sistema compatible) donde cada fila representa una ecuación y cada columna una incógnita o variable. De esta forma, cada elemento en la matriz puede tomar los valores cero o uno, si es que para el elemento $a_{i\,j}$ existe una vinculación entre la función i y la variable j , caso contrario, $a_{i,j} = 0$.

Sea por ejemplo el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} f_1\ (x_1) &= 0 \\ f_2\ (x_1,\ x_2) &= 0 \\ f_3\ (x_1,\ x_2,\ x_3) &= 0 \\ f_4\ (x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4) &= 0 \\ f_5\ (x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4,\ x_5) &= 0 \end{aligned} \qquad (28)$$

Aquí la matriz de incidencia u ocurrencia es la indicada en la Figura (IV.1), que se obtiene directamente de la definición de la misma, esto es, considerando en filas y columnas las funciones y variables respectivamente, y en cada posición se indicará si existe o no relación entre ellas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1				
f_2	1	1			
f_3	1	1	1		
f_4	1	1	1	1	
f_5	1	1	1	1	1

Figura IV.1: Matriz de ocurrencias del sistema de ecuaciones. (28)

Se define como variable de salida de una ecuación a una variable asignada a la misma, tal que se supone puede calcularse a partir de conocer el valor de las demás variables contenidas en dicha ecuación. Se prescinde del hecho que pueda explicitarse, o deba procederse en forma iterativa con algunos de los métodos discutidos en el capítulo anterior.

Si tomamos el listado de pares (x_i, f_i), correspondientes a cada asignación realizada, tenemos el conjunto de salida. Debe respetarse para esta definición, el siguiente principio: Cada ecuación debe tener asignada una y sólo una variable de salida, mientras que cada variable es variable de salida de una y sólo una ecuación.

Es evidente que al necesitarse para el cálculo de cada variable de salida x_i el valor de las demás variables que están contenidas en f_i, toda asignación de un conjunto de salida define un orden o secuencia en la cual el sistema de ecuaciones es resuelto.

IV.3.1 Algoritmo de Steward para la Determinación del Conjunto de Salida

En el año 1962 Steward propuso un método para determinar un posible conjunto de salida, utilizando la matriz de incidencia. Aquí sólo discutiremos algunos detalles del algoritmo, sugiriendo al lector interesado la lectura de la bibliografía citada para profundizar el tema. La incidencia se obtiene para una función (fila) como el número de variables que involucra y para una variable, por el número de funciones en la que participa (columna).

La idea básica del método es tomar la fila (columna) con menor número de incidencia, lo cual implica que de la ecuación que depende del menor número de incógnitas (o alternativamente, la incógnita afecta el menor número de ecuaciones) y de la fila en cuestión (o columna) se selecciona el elemento que pertenezca a una columna (fila) con el menor número de incidencia. De esta manera se asigna la variable representada por tal columna a la ecuación asociada a la fila correspondiente. Luego, se eliminan de la matriz ambas, fila y columna, prosiguiendo con el algoritmo hasta que se reduzca la matriz a la dimensión unitaria. El procedimiento se comprenderá mejor con un ejemplo, por caso el sistema de ecuaciones cuya matriz de ocurrencia es la indicada en la Figura (IV.1). La fila con el menor número de incidencia es la primera (uno), correspondiente a la variable x_1. Se asigna $x_1 \rightarrow f_1$, luego

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos
Autor: Nicolás J. Scenna y col.
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

se elimina dicha fila y columna, obteniéndose la matriz de la Figura. (IV.2).

	x_2	x_3	x_4	x_5
f_2	1			
f_3	1	1		
f_4	1	1	1	
f_5	1	1	1	1

Figura IV.2: Matriz de ocurrencias resultante luego de eliminar la *fila 1* y la *columna 1* de la matriz de ocurrencias de la Figura (IV.1).

Nuevamente, la fila de menor incidencia es la primera con uno, siendo $x_2 \rightarrow f_2$. Luego, al eliminar fila y columna, queda una matriz de orden 3, que por la estructura de la matriz de incidencia se comprende claramente que implicará las siguientes asignaciones:

$$f_3 \rightarrow x_3$$

$$f_4 \rightarrow x_4$$

$$f_5 \rightarrow x_5$$

Esta asignación del conjunto de salida implica un orden de resolución que puede indicarse según la Figura (IV.3).

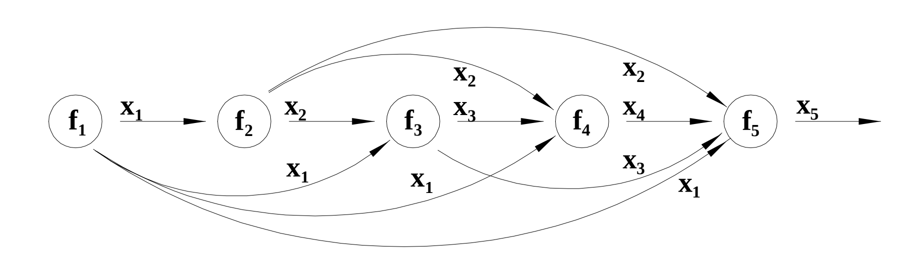


Figura IV.3: Orden de resolución del sistema de ecuaciones.

Puede notarse que en este caso se encuentra una secuencia de resolución acíclica. En general, cuando la estructura de la matriz de ocurrencia es diagonal, o triangular como en este caso, es fácil demostrar que existirá una secuencia de resolución acíclica, esto es, sin necesidad de recurrir a variables de iteración o iteradoras. Asimismo, puede demostrarse que es posible resolver el sistema ecuación a ecuación (variable a variable) sin necesidad de resolver subsistemas de ecuaciones simultáneas siguiendo un orden dado.

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

$$f_1\ (x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4,\ x_5)$$
$$f_2\ (x_3,\ x_2,\ x_5)$$
$$f_3\ (x_2,\ x_3,\ x_4) \tag{29}$$
$$f_4\ (x_1,\ x_4,\ x_5)$$
$$f_5\ (x_2,\ x_3,\ x_4,\ x_5)$$

cuya matriz de ocurrencia se indica en la Figura (IV.4):

	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1	1	1	1	1
f_2		1	1		1
f_3		1	1	1	
f_4	1			1	1
f_5		1	1	1	1

Figura IV.4: Matriz de incidencia del Sistema de Ecuaciones (29).

La fila con el menor número de incidencia es la *3*. En cambio para las columnas es la *2*, para x_1. Luego, operando en la columna x_1, f_4 tiene menor incidencia *3* que f_1, por lo tanto se asigna a x_1, $f_4 \rightarrow x_1$. Se eliminan fila y columna, resultando la matriz de la Figura (IV.5):

	x_2	x_3	x_4	x_5
f_1	1	1	1	1
f_2	1	1		1
f_3	1	1	1	
f_5	1	1	1	1

Figura IV.5: Matriz de ocurrencia luego de eliminar x_1 y f_1 de la Figura (IV.4).

Para las filas la menor incidencia es *3* (f_2 y f_3). Lo mismo para las columnas (*3* para x_5 y x_4). Elegimos f_2, asignando x_5 (incidencia *3*), $f_2 \rightarrow x_5$; luego, eliminando fila y columna, nos queda (Figura (IV.6)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

	x_2	x_3	x_4
f_1	1	1	1
f_3	1	1	1
f_5	1	1	1

Figura IV.6: Matriz de incidencia luego de eliminar f_2 y x_5 de la Figura (IV.5).

Las funciones f_1, f_3 y f_5 forman parte de una partición o subconjunto que debe resolverse en forma simultánea. Aquí podemos realizar una asignación arbitraria $(f_3 \rightarrow x_3)$, $(f_1 \rightarrow x_2)$, $(f_5 \rightarrow x_4)$. Luego, el orden de resolución o secuencia resulta según se indica en la Figura (IV.7):

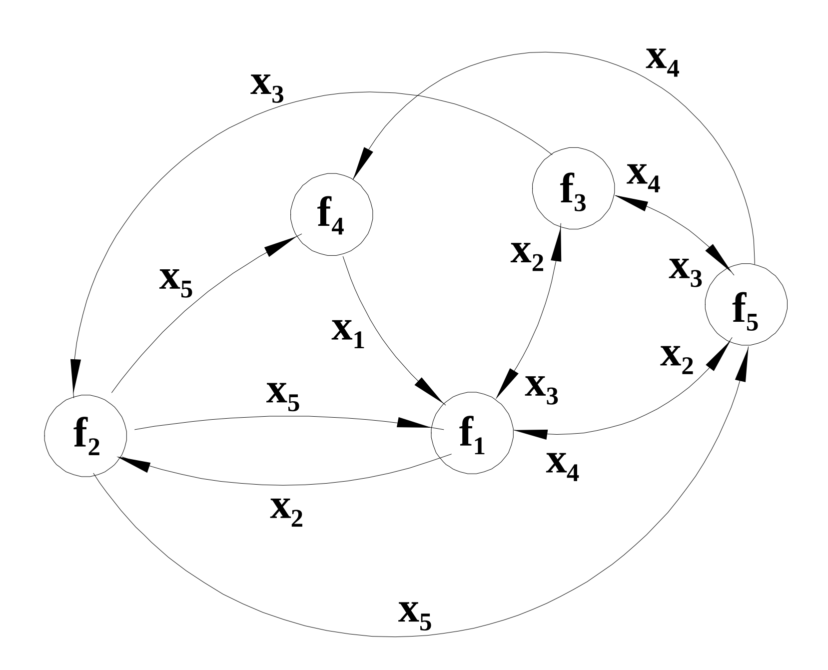


Figura IV.7: Orden de resolución del sistema de Ecuaciones (29).

Como se observa en la Figura (IV.7), el subconjunto (f_1, f_3, f_5) debe resolverse simultáneamente, habiéndose solucionado primero las restantes ecuaciones.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Esto implica, según vimos en el Capítulo III un orden cuadrático de convergencia. Sin embargo, podemos linealizar el sistema, (rasgar), introduciendo variables de corte (iteradoras) que permitan resolverlo en forma acíclica.

Esta estrategia reemplaza la resolución del sistema en forma simultánea por una secuencia dada (f_1, f_3, f_5) modificando el orden cuadrático por uno menor (sustitución directa, Wegstein, etc.).

Más adelante se discutirán métodos para rasgar un sistema de ecuaciones. En lo inmediato nos centraremos en el siguiente problema: Dado un modelo para un proceso o equipo específico, notaremos que generalmente contiene más variables que ecuaciones, por lo cual algunas deben especificarse. Luego, debemos tomar un criterio para hacerlo.

IV.3.2 Especificaciones de Variables y Grados de Libertad de un Sistema de Ecuaciones

Sea el siguiente sistema de ecuaciones:

$$
\begin{aligned}
f_1\ (x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4) &= 0 \\
f_2\ (x_3,\ x_4,\ x_5) &= 0 \\
f_3\ (x_5,\ x_6,\ x_1) &= 0
\end{aligned}
\qquad (30)
$$

que puede ser representado según el siguiente esquema (que más adelante llamaremos grafo bipartito):

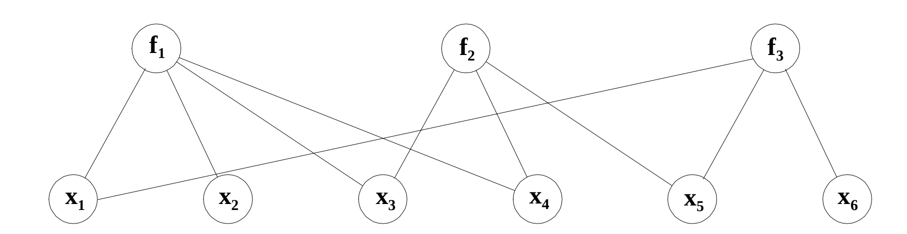


Figura IV.8

Aquí existen nodos que representan a las funciones y otros que representan a las variables. Los arcos simplemente indican que la variable x_i está vinculada a la ecuación f_j. Dado que existen 6 variables y 3 ecuaciones, tenemos 3 variables a especificar de tal manera de lograr un sistema compatible. No obstante, existen varias opciones para asignar las mencionadas variables. Por ejemplo, sea el conjunto especificado el $(x_6,\ x_5,\ x_4)$. De acuerdo a esto, el diagrama nos queda de la siguiente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

forma:

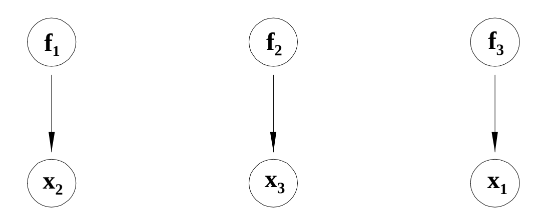


Figura IV.9: Sistema luego de la asignación de (x_6, x_5, x_4) como variables especificadas.

Luego, existe una secuencia acíclica sin necesidad de iterar ya que conocidas las variables especificadas se puede resolver en dicha forma. El esquema de orden de resolución es (ver Figura (IV.10)):

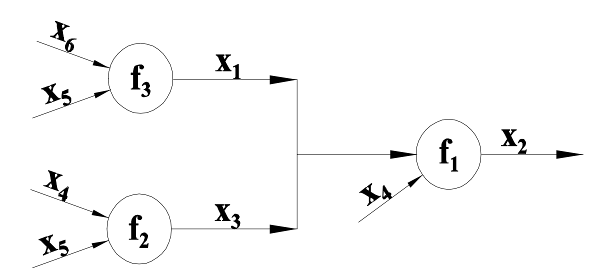


Figura IV.10: Orden de resolución del sistema de ecuaciones.

que surge simplemente por análisis de la Figura IV.8. Sin embargo, no es el mencionado el único conjunto de asignaciones que puede realizarse.

En efecto, si en cambio el conjunto especificado fuera (x_3, x_4, x_6), tenemos el siguiente esquema de resolución (ver Figura (IV.11)) y de asignaciones de variables (ver Figura (IV.12)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

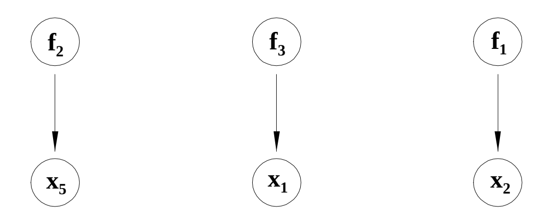


Figura IV.11: Sistema de la Figura (IV.9) luego de la asignación de $(x_3,\ x_4,\ x_6)$.

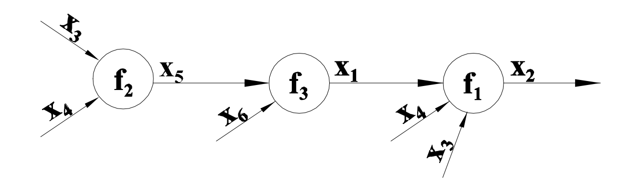


Figura IV.12: Orden de resolución para el Sistema (30) luego de la asignación indicada en la Figura (IV.11).

Por último, especificando $(x_1,\ x_2,\ x_6)$ tenemos (ver Figura (IV.13)):

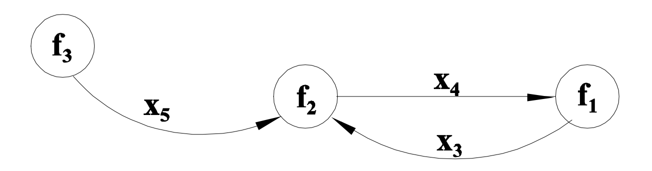


Figura IV.13: Orden de resolución del Sistema (30) luego de la asignación $(x_1,\ x_2,\ x_6)$.

Aquí resulta en una secuencia cíclica de resolución, esto es, deberán resolverse simultáneamente $f_1\ y\ f_2$, o bien suponerse un valor para $x_4\ o\ x_3$ e iterarse

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

secuencialmente hasta lograr convergencia, según los métodos analizados en el capítulo anterior.

El lector puede probar, como ejercitación, que la especificación o asignación (x_1, x_4, x_6) nos lleva a una secuencia acíclica.

Como conclusión, puede apreciarse que la elección de un conjunto de variables para ser especificadas no es neutra, sino que según se la realiza, el sistema resultante podrá o no ser resuelto secuencialmente,o en otras palabras, existe un grado de dificultad inherente que depende estrictamente del modo en que se han realizado las asignaciones. Dado que en sistemas de elevada dimensión es muy difícil deducir cómo especificar dicho conjunto, de manera tal de minimizar el esfuerzo para resolver luego el sistema, se han propuesto numerosos algoritmos para realizar dicha tarea.

En la próxima sección analizaremos el algoritmo de Lee, Christensen y Rudd, para tal fin. Se planteará el problema tendiendo progresivamente a ligar el concepto de sistema de ecuaciones con simulación, ya que básicamente, según ya sabemos, la simulación de un proceso consiste en implementar el modelo del mismo (sistema de ecuaciones) en un algoritmo computacional y resolverlo, proponiendo valores a ciertas variables de entrada para obtener las correspondientes a las de salida (resultados de la simulación).

Como hemos mencionado en el Capítulo I, todo proceso, equipo y/u operación puede representase a través de un modelo que puede poseer diversas características, según sea el problema a resolver. Si enfrentamos la resolución de los balances de materia y energía de un sistema, lo más común es que el modelo estará compuesto por un sistema de ecuaciones algebraicas si representamos el comportamiento en estado estacionario y además trabajamos con parámetros concentrados; esto es, no nos interesan como el caso de un reactor tanque agitado, las variación de las propiedades ni en el espacio ni en el tiempo, ya que de lo contrario necesitamos ecuaciones diferenciales a derivadas parciales.

Dentro de este contexto, muy preliminarmente, podemos decir que simular un equipo o un proceso significa implementar el modelo que lo representa computacionalmente y a partir de dicho programa/sistema computacional, proponer los valores, variables o parámetros de entrada para obtener los resultados de interés.

Los datos de entrada pueden ser los parámetros operativos de los equipos (números de etapas, características de la torre de destilación, áreas de intercambio, etc.) y las características de las corrientes de alimentación al equipo/proceso, tales como caudales, temperaturas, presiones y composiciones de cada una. Los resultados podrían ser todas las corrientes intermedias y las salidas a la planta, los perfiles internos en las torres de destilación, los servicios de calentamiento y enfriamiento, etc.

Resulta necesario comprender cómo desarrollar modelos y además cómo enfrentar la solución de los mismos. Aquí nos ocuparemos en particular de la estructura del sistema de ecuaciones algebraicas resultante y los procedimientos apropiados para encarar la solución de los grandes sistemas, que, en general, involucran variables de iteración y además requieren procedimientos de particionado

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

del sistema en subsistemas de más fácil solución.

En general, un sistema de ecuaciones tiene la forma:

$$f_i\ (\underline{x}_1,\ \underline{x}_2,\ ....\underline{x}_n)\ =\ \underline{0}\quad ;\quad i\ =\ 1,\ ....\ ,\ M \tag{31}$$

Entonces, los grados de libertad del sistema se definen como la diferencia entre el número de variables menos el de ecuaciones:

$$G\ell\ =\ n\ -\ m \tag{32}$$

Ya mencionamos que se tiene un mayor número de variables que de ecuaciones al plantear el modelo de un equipo o proceso. Por lo tanto, para obtener un sistema compatible, deberán especificarse Gℓ variables, de tal forma de lograr igual número de ecuaciones que de incógnitas.

El problema radica en que existen numerosas variantes para asignar estas variables, si suponemos el planteo general en el cual todas las variables son desconocidas o factibles de ser especificadas. Se puede fácilmente demostrar que el número de posibles combinaciones para asignar los Gℓ grados de libertad responde a la siguiente expresión:

$$NA\ =\ C^{n}_{G\ell}\ =\ \binom{n}{G\ell}\ =\ \frac{n!}{m!\ G\ell!} \tag{33}$$

Este número de alternativas es muy grande pero en la práctica están limitadas por criterios físicos a esquemas realistas de aplicación.

IV.3.3 Algoritmos para Selección de Variables a Especificar

Lee, Christensen y Rudd introdujeron un algoritmo para la selección de variables de tal forma de lograr una secuencia acíclica de resolución (sin iteraciones). Se introduce para el modelado el grafo bipartito. Éste se construye definiendo nodos *f* (funciones) y nodos *v* (variables). De este modo, los arcos dirigidos conectan las ecuaciones con las variables relacionadas.

En la Figura (IV.14) vemos un ejemplo de grafo bipartito correspondiente al sistema de ecuaciones (34). Como se observa, los nodos superiores representan a cada función, mientras que los nodos inferiores (ν) representan a las variables. Dado que, por ejemplo, f_2 esté vinculado con las variables ν_3 y ν_6, en la figura IV.14 existen arcos que vinculan dichos nodos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$
\begin{aligned}
&f_1\ (v_1,\ v_2,\ v_3,\ v_4) = 0\\
&f_2\ (v_3,\ v_6) = 0\\
&f_3\ (v_5,\ v_6) = 0\\
&f_4\ (v_2,\ v_4,\ v_5) = 0
\end{aligned}
\qquad (34)
$$

Se define como grado local al número de corrientes ligadas a cada nodo (ν). Por ejemplo, en la Figura (IV.14) el grado local para v_1, $\nu(v_1) = 1$. El método se basa, según Osteward, en las siguientes consideraciones:

- Cada ecuación contiene exactamente una variable de salida.
- Cada variable aparece como elemento de salida en solamente una ecuación.

Por otra parte, las ecuaciones de grado uno $f_i\ (x_j) = 0$ no agregan información, ya que si existe una solución real y única $x_j = c$, ésta es la variable determinada, por lo que se eliminan del tratamiento en la Figura (IV.14).

A continuación aplicaremos el algoritmo al sistema de la Figura (IV.14), esto es, el Sistema de Ecuaciones (34).

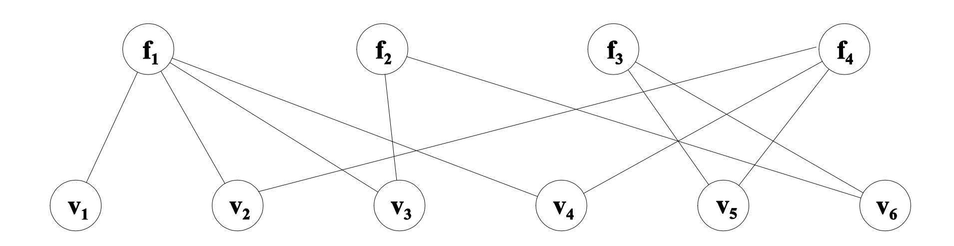


Figura IV.14: Grafo que representa al Sistema de Ecuaciones (34).

Ejemplo de aplicación del algoritmo:

Existe $\nu(f_i) = 1$?
No, no hay funciones y variables a eliminar.
$\nu(v_j) = 1$?
Sí, v_1, entonces $f_1 \rightarrow v_1$; luego, asignando v_1 como variable de salida de f_1, el grafo de la Figura (IV.14) queda, según se observa en la Figura (IV.15):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nótese que también podría (entre otras) realizarse la asignación $f_1 \rightarrow v_2$. Para una adecuada decisión, debemos conocer más información acerca del sistema.

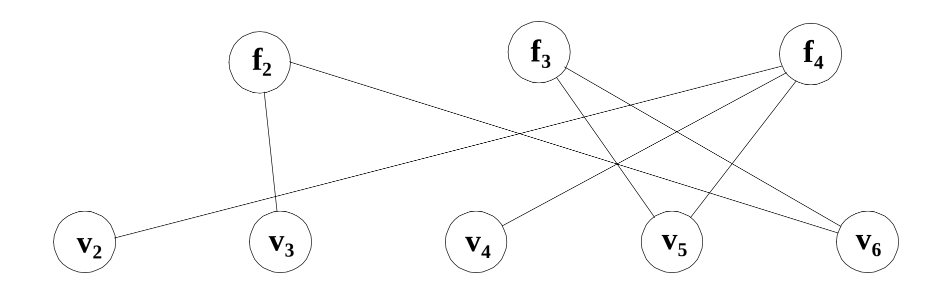


Figura IV.15: Grafo luego de eliminar v_1 y f_1.

$\varphi(v_j) = 1$?
Sí, v_2, entonces $f_4 \rightarrow v_2$; luego tenemos el siguiente grafo bipartito (Figura (IV.16)):

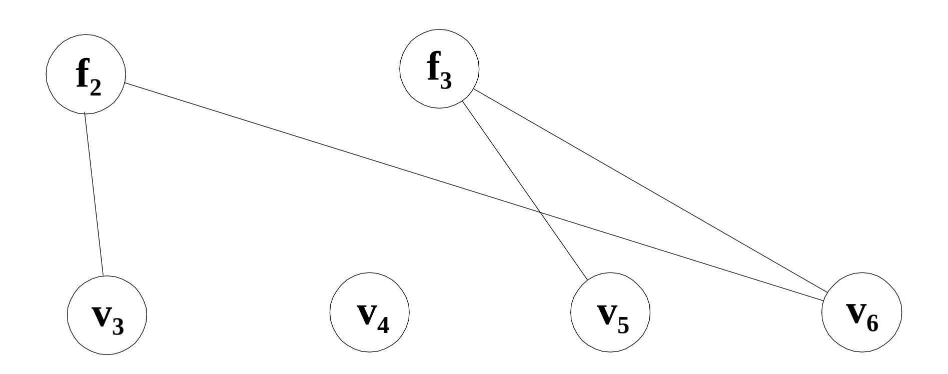


Figura IV.16: Grafo luego de eliminar f_4 y v_2.

$\varphi(v_j) = 1$?Sí, v_3; luego resulta el siguiente grafo (ver Figura (IV.17)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

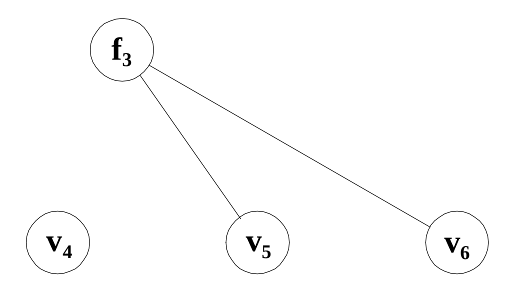


Figura IV.17: Grafo luego de eliminar f_2 *y* v_3.

$\varphi(v_j) = 1$? Sí, v_5; luego $f_3 \rightarrow v_5$.
$\varphi(v_j) = 1$? No.
$\varphi(v_j) = 0$? Sí, $(v_4 \ , \ v_6)$.
Quedan f_i ? No, ⇒ *sistema acíclico.*

Vemos que el sistema de Ecuaciones (34) tiene 6 - 4 = 2 grados de libertad. Aquí el algoritmo nos permite la selección (entre las varias alternativas posibles), que nos brinda una secuencia de resolución de mínima dificultad, en este caso, acíclica.

Se ha supuesto que cualquier variable de salida elegida se puede explicitar de toda y cualquier ecuación. Por otra parte, no se utilizó conocimiento heurístico (información adicional) sobre la conveniencia de ligar una variable de salida con una función, sólo se utilizó el criterio de seleccionar la primer variable de izquierda a derecha, según una hipotética implementación (listado de nodos) en un algoritmo computacional. Este criterio puede mejorarse, pero se requiere algún tipo de información adicional, según mencionamos en el párrafo anterior. Este algoritmo, someramente expuesto a través del ejemplo, concluye cuando, o bien genera una secuencia acíclica, o bien se encuentran ciclos irreductibles que deben ser analizados bajo otro enfoque.

A continuación se expondrá un nuevo ejemplo, y luego se discutirán aspectos de los casos que presentan ciclos.

Ejemplo:

Sea el sistema de la Figura (IV.18). Aquí se representa un conjunto de ductos que se unen en un único conducto, contemplando las variables relacionadas con cada corriente. Se pretende generar el modelo, (sistema de ecuaciones) y encontrar un conjunto de variables a especificar de tal forma que la secuencia de resolución resulte

conveniente.

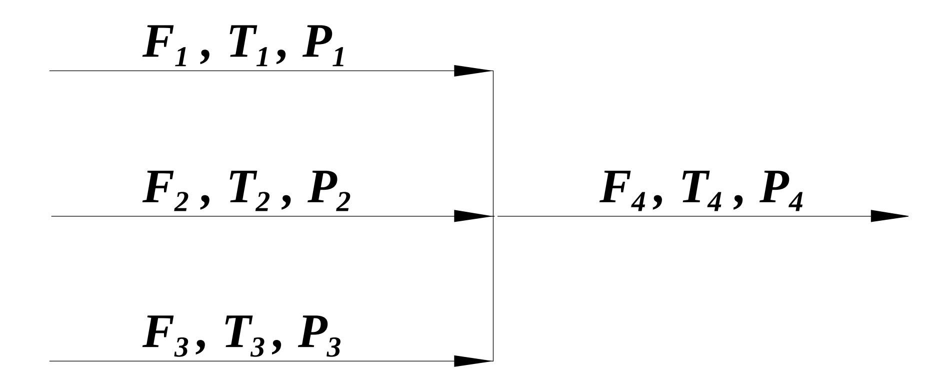


Figura IV.18: Esquema del sistema a modelar.

Hipótesis:

- Sistema adiabático y estacionario.
- Cañerías de igual sección y altura equivalente (trabajo de la fuerza de gravedad despreciable).
- Pérdidas de carga despreciables.
- Densidad de los fluidos constante. Fluido puro.
- Trabajo de las fuerzas de presión despreciable. Las presiones de las corrientes de entrada y salida son iguales.

Balance de materia:

$$f_1 = F_1 + F_2 + F_3 - F_4 = 0 \qquad (35)$$

Balance de energía:

$$f_2 = F_1\, H_1 + F_2\, H_2 + F_3\, H_3 - F_4\, H_4 = 0 \qquad (36)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ecuaciones constitutivas:

$$\begin{aligned} f_3 &= H_1\ (T_1,\ P_1) = 0 \\ f_4 &= H_2\ (T_2,\ P_2) = 0 \\ f_5 &= H_3\ (T_3,\ P_3) = 0 \\ f_6 &= H_4\ (T_4,\ P_4) = 0 \end{aligned} \qquad (37)$$

En función de las hipótesis asumidas, podemos suponer que la presión de descarga es igual a las de la corriente de entrada, esto es:

$$P_1 \cong P_2 \cong P_3 \cong P_4 = P$$

Por lo tanto, las ecuaciones anteriores pueden expresarse según el siguiente sistema:

$$\begin{aligned} & f_1\ (F_1,\ F_2,\ F_3,\ F_4) = 0 \\ & f_2\ (F_1,\ H_1,\ F_2,\ H_2,\ F_3,\ H_3,\ F_4,\ H_4) = 0 \\ & f_3\ (H_1,\ T_1,\ P) = 0 \\ & f_4\ (H_2,\ T_2,\ P) = 0 \\ & f_5\ (H_3,\ T_3,\ P) = 0 \\ & f_6\ (H_4,\ T_4,\ P) = 0 \end{aligned} \qquad (38)$$

Tenemos por lo tanto *6* ecuaciones y *13* incógnitas por lo que disponemos de *7* grados de libertad, variables de diseño o variables a especificar. Por otra parte, en el caso general, las variantes para especificar son:

$$\binom{13}{7} = \frac{13!}{6!\ 7!} = 1716$$

Como se observa, son enormes las variantes, pese a este problema sencillo; pensemos en un planta completa, con miles de ecuaciones e incógnitas. Las variables a especificar dependerán del problema a resolver. Por ejemplo, sea el caso que querramos calcular las variables de salida, conocidas las de entrada. De esta manera, las seis variables a especificar deberán surgir del conjunto:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$(F_1, F_2, F_3, T_1, T_2, T_3, P_1, P_2, P_3)$. Según vimos, basta con las seis primeras y un dato de presión, , ya que asumimos todas las presiones equivalentes.

Si bien este conjunto de especificaciones surge de la conveniencia al conocer ciertas variables, no significa que sea la mejor alternativa para la secuencia de resolución (cíclica o iterativa vs. secuencia acíclica, esto es sin necesidad de iteraciones). En la Figura (IV.19) se observa el grafo bipartito para este caso ($v_1=F_1$, $v_2=F_2$, $v_3=F_3$, $v_4=F_4$, $v_5=H_1$, $v_6=H_2$, $v_7=H_3$, $v_8=H_4$, $v_9=T_1$, v_{10},$=T_2$, $v_{11}=T_3$, $v_{12}=T_4$, $v_3=P$):

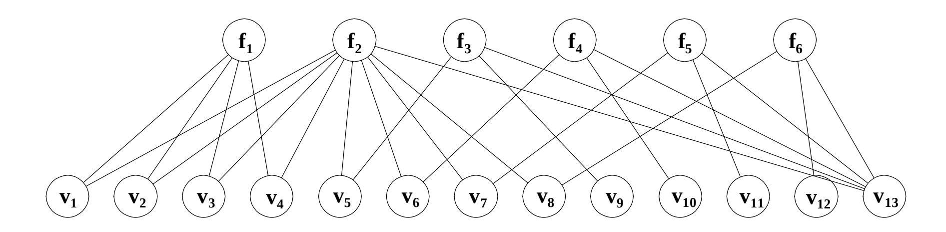


Figura IV.19: Grafo bipartito, Sistema de Ecuaciones (38).

Como hemos visto, el algoritmo de Lee, Christensen y Rudd permite determinar un conjunto de asignaciones conveniente. Por lo tanto, en lo que sigue aplicaremos el procedimiento a los efectos de juzgar la especificación arriba mencionada.

Aplicación del algoritmo de Lee, Christensen y Rudd

$\varphi(f_i) = 1$?. No.
$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_9 \Rightarrow f_3 \rightarrow v_9$. Resulta por lo tanto el grafo de la Figura (IV.20).

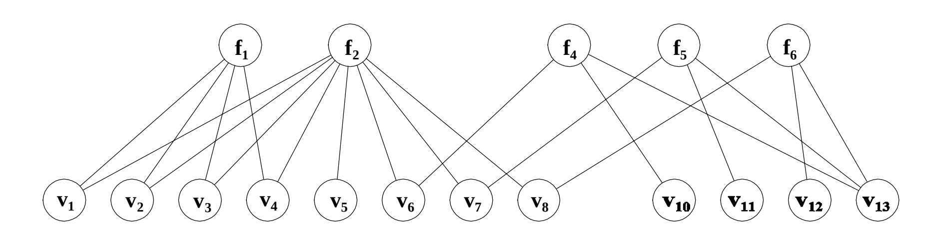


Figura IV.20

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_5 \Rightarrow f_2 \rightarrow v_5$. Luego obtenemos el grafo de la Figura (IV.21).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

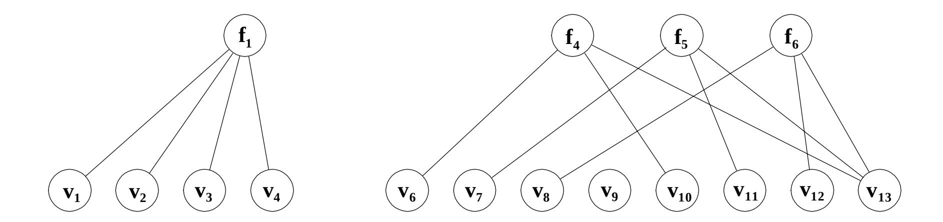


Figura IV.21: Grafo luego de la eliminación de f_2 y v_5 .

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_1 \Rightarrow f_1 \rightarrow v_1$. Nos queda ahora el grafo indicado en la Figura (IV.22).

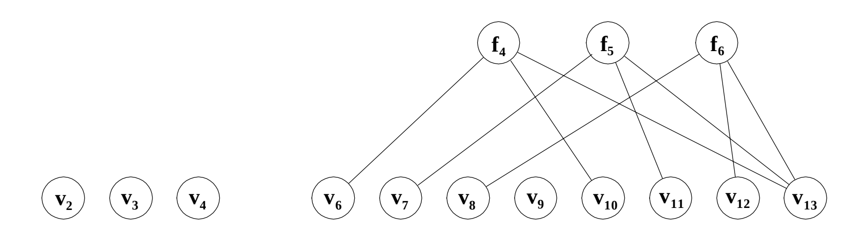


Figura IV.22: Grafo luego de la eliminación de f_1 y v_1 .

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_6 \Rightarrow f_4 \rightarrow v_6$. Luego tenemos el grafo indicado en la Figura (IV.23).

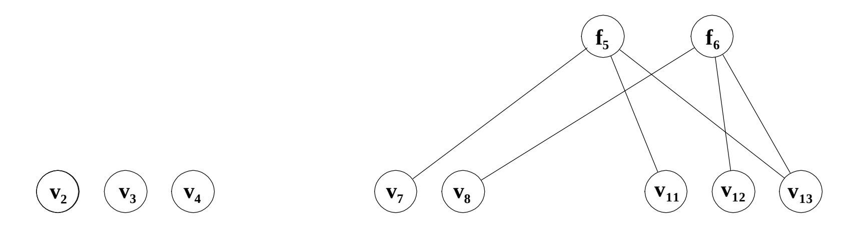


Figura IV.23: Grafo luego de la eliminación de f_4 y v_6 .

$\varphi(v_i) = 1$?. Sí, $v_7 \Rightarrow f_5 \rightarrow v_7$. Luego, tenemos el siguiente esquema (ver Figura (IV. 24)):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

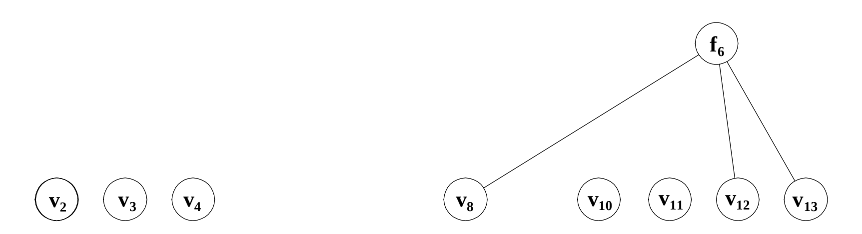


Figura IV.24: Grafo luego de la eliminación de f_5 y v_7.

$\varphi(v_i) = 1$? Sí, $v_8 \Rightarrow f_3 \rightarrow v_8$.
$\varphi(v_i) = 1$? No.
$\varphi(v_i) = 0$? Sí, $\Rightarrow (v_2, v_3, v_4, v_{10}, v_{11}, v_{12}, v_{13})$.
Queda algún f_i ? No ⇒ sistema acíclico.

El conjunto de variables a especificar obtenido por el algoritmo involucra una secuencia de resolución según se indica en la Figura (IV.25).

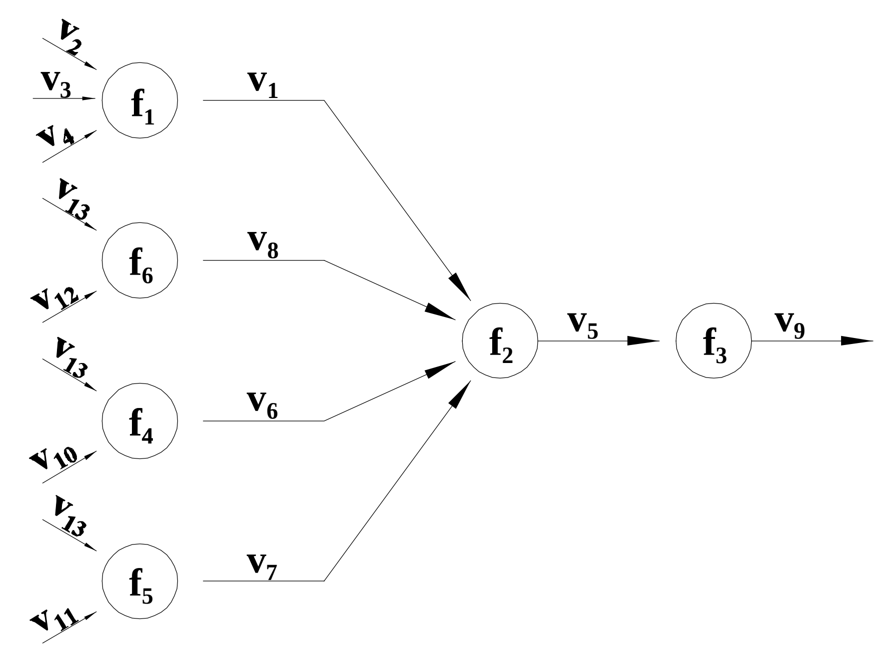


Figura IV.25: Secuencia de cálculo para el Sistema de Ecuaciones (38), una vez especificados $(v_2, v_3, v_4, v_{10}, v_{11}, v_{12}, v_{13})$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como se observa, al no incluir ninguna información adicional, respecto a la conveniencia de especificar o no determinadas variables, obtenemos un conjunto específico distinto del conjunto (F_1, F_2, F_3, T_1, T_2, T_3, P) mencionado anteriormente. Se puede demostrar fácilmente que adoptando este conjunto también obtenemos una secuencia de resolución acíclica, por lo que en este caso la elección dependerá de la conveniencia. No obstante, no siempre la secuencia impuesta por el *criterio directo* (especificamos las entradas para calcular las salidas como es clásico en simulación secuencial, según veremos en el próximo capítulo), resultará en una secuencia acíclica y por lo tanto, no siempre será la más conveniente. Sin embargo, físicamente es atractiva ya que representa naturalmente el flujo de la planta real.

Probaremos seguidamente, que en este caso, la especificación de las entradas también lleva una secuencia acíclica. En la Figura (IV.26) se indica el grafo de partida donde las variables (v_1, v_2, v_3, v_9, v_{10}, v_{11}, v_{13}) han sido especificadas, esto es son conocidas. En efecto, al especificar este último conjunto de variables nos queda (ver Figura (IV.26)):

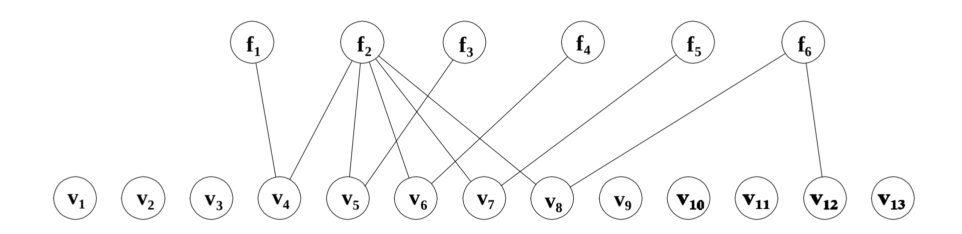


Figura IV.26

Aplicando el algoritmo:
$\varphi\ (f_i) = 1$? Sí, f_1; luego $f_1 \Rightarrow v_4$. El nuevo grafo es (ver Figura (IV.27)):

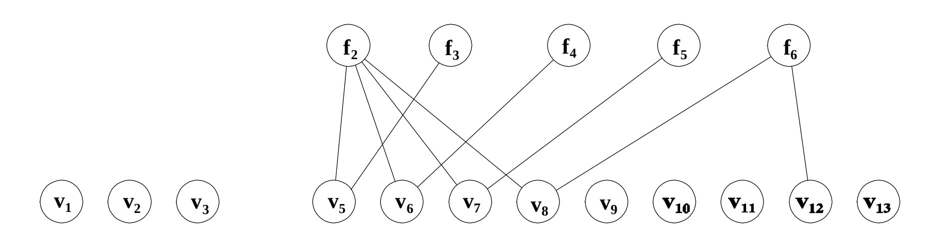


Figura IV.27

$\varphi\ (f_i) = 1$? Sí, f_4; luego $f_4 \Rightarrow v_6$; luego resulta el grafo de la Figura (IV.28).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

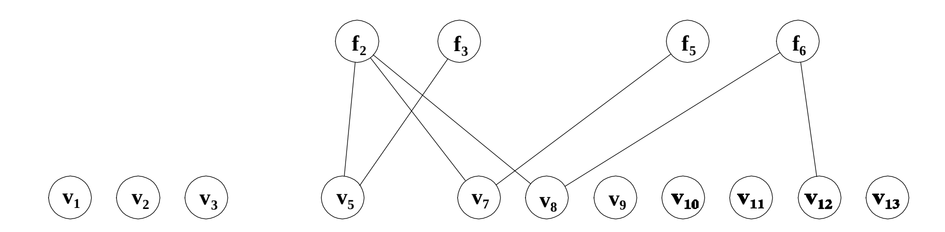


Figura IV.28

φ (f_i) = 1 ?Sí, f_3; luego $f_3 \Rightarrow v_5$; entonces resulta el grafo de la Figura (IV.29).

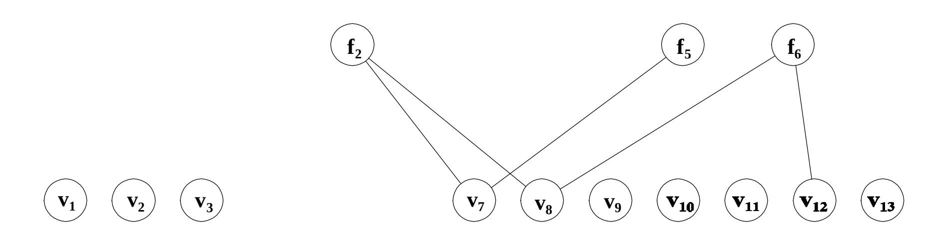


Figura IV.29

φ (f_i) = 1 ?Sí, f_5; luego $f_5 \Rightarrow v_7$; entonces tenemos el grafo de la Figura (IV.30).

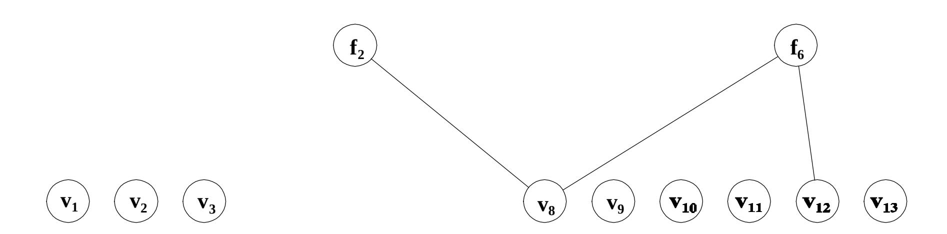


Figura IV.30

$\varphi(f_i) = 1$? Sí, $f_2 \Rightarrow f_2 \rightarrow v_8$.
$\varphi(f_i) = 1$? Sí, $f_6 \Rightarrow f_6 \rightarrow v_{12}$.
$\varphi(f_i) = 1$? No.
$\varphi(v_i) = 0$? Sí.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Esto implica que se encuentra una secuencia de resolución acíclica según ya anticipamos. En efecto, el lector puede, a partir de los pares (f_i, v_i) encontrados, armar el orden de resolución correspondiente, el cual resulta acíclico.

IV.3.4 Sistemas Cíclicos

La variante propuesta, dentro del algoritmo que estamos analizando, para el caso en que se detecten ciclos, se basa en el hecho que el subgrafo irreducible tiene al menos un $\varphi(v_j) \geq 2$.

Se propone cortar (rasgar) el grafo de tal forma que el número de variables iteradoras sea mínimo. Estas variables son aquellas que deben ser *inicializadas* para generar una secuencia iterativa a los efectos de resolver el sistema de ecuaciones correspondiente.

En general podrían necesitarse *c* cortes, donde *c* es menor que el número de ecuaciones f_i; tales que se resuelven si se asignan variables de salida a los posibles *c* f_i nodos, que surgen de los cortes, ya que de esta manera el grafo resultante puede procesarse según lo visto en los ejemplos anteriores. El número mínimo c_{min} de variables de corte se relaciona con el grado local de la siguiente forma:

$$c_{min} = mín\ \varphi(v_j) - 1 \qquad (39)$$

Ejemplo:

Sea el sistema:

$$\begin{aligned} &f_1\ (x_1,\ x_2,\ x_3) = 0 \\ &f_2\ (x_1,\ x_2,\ x_4,\ x_6) = 0 \\ &f_3\ (x_3,\ x_4,\ x_5,\ x_6) = 0 \\ &f_4\ (x_3,\ x_4,\ x_5,\ x_6,\ x_7,\ x_8) = 0 \\ &f_5\ (x_6,\ x_7,\ x_8) = 0 \end{aligned} \qquad (40)$$

El grafo correspondiente es el indicado en la Figura (IV.31), según el procedimiento ya discutido en los ejemplos anteriores.

En este caso, como vemos, no existe $\varphi\ (v_j) = 1$ ni $\varphi\ (f_i) = 1$. El menor $\varphi(v_j)$ es 2. Luego, esta situación indica la existencia de un sistema cíclico y la necesidad de determinar corrientes de corte (rasgado).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

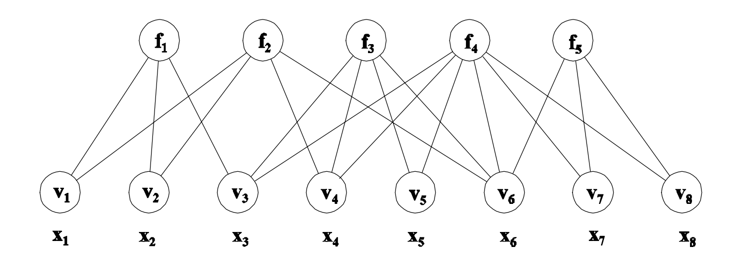


Figura IV.31: Grafo correspondiente al Sistema de Ecuaciones (40).

Minímo $\varphi(v_j) = 2$; $C_{\min} = 2 - 1 = 1$
Comenzando con $f_1 \rightarrow v_1$ (iteradora), nos queda (ver Figura (IV.32)):

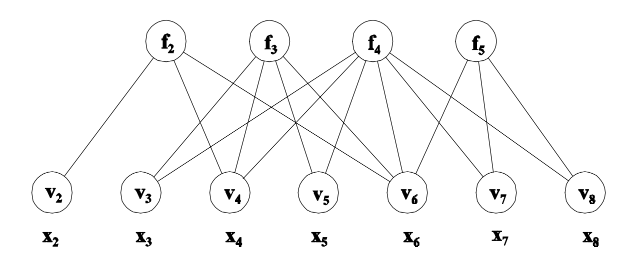


Figura IV.32: Grafo luego de eliminar f_1 y v_1.

Tenemos al menos un nodo de variables de grado local uno (v_2). Luego aplicamos el algoritmo ya visto para sistemas acíclicos:

$\varphi(f_i) = 1$? No.
$\varphi(v_i) = 1$? Sí, $v_2 \Rightarrow f_2 \rightarrow v_2$; tenemos entonces el grafo de la Figura (IV.33).

Nuevamente, en este caso, no encontraremos variables con $\varphi(v_j) = 1$. Luego, comenzamos con el procedimiento para sistemas cíclicos. Nótese que siempre deberá agotarse la búsqueda del sistema acíclico utilizando las C_{min} *f* combinaciones posibles de nodos. Si no se logra, debe incrementarse *C* en uno hasta lograrlo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

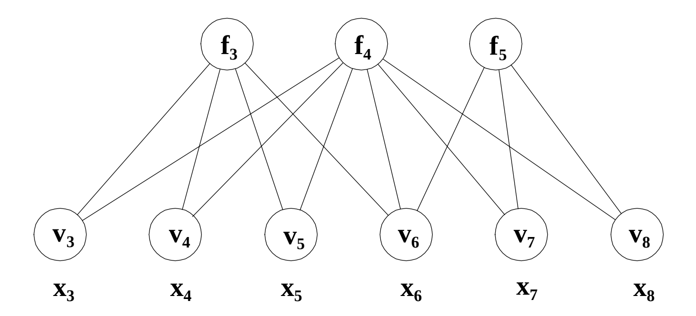


Figura IV.33: Grafo luego eliminar f_2 y v_2.

$\varphi(v_j) = 1$? No.
Mínimo $\varphi(v_j) = 2$, $C_{min} = 2 - 1 = 1$.
Asignamos $f_3 \to v_3$ (iteradora); luego nos queda el grafo de la Figura (IV.34).

Al encontrar un $\varphi(v_j) = 1$ comenzamos con el algoritmo para sistema acíclicos.
$\varphi(v_j) = 1$? Sí, v_4, luego $f_4 \to v_4$. Nos queda entonces el grafo de la Figura (IV.35).
$\varphi(v_i) = 1$? Sí, $v_6 \Rightarrow f_5 \to v_6$.
$\varphi(v_j) = 1$? No.
$\varphi(v_j) = 0$? Sí, $\Rightarrow (v_5,\ v_7,\ v_8)$.

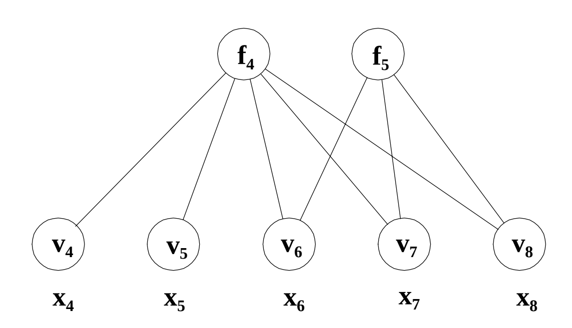


Figura IV.34: Grafo luego de eliminar f_3 y v_3.

Nótese que al igual que los casos anteriores, las asignaciones realizadas (por ejemplo $v_6 \to f_5$) no son únicas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Dado que no quedan f_i, se finaliza el algoritmo. Luego, tenemos como variables iteradoras (v_1, v_3) y las variables a ser especificadas: (v_5, v_7, v_8). Vemos que este número coincide con los grados de libertad del sistema ($G\ell$ = 8 - 5 = 3). La secuencia de resolución para este caso es la que se muestra en la Figura (IV.36).

Nuevamente, al aplicar el procedimiento, la selección de variables la hicimos tomando la primer función o variable según corresponda, de izquierda a derecha, suponiendo la implementación de un algoritmo que manipule las variables intermedias según ese orden (se supone que están archivadas en una lista).

Obviamente, si se aplican criterios heurísticos o provenientes del conocimiento intrínseco del sistema es posible mejorar mucho la perfomance del algoritmo, en particular al seleccionar variables iteradoras. No se analizarán aquí estos criterios, al igual que los casos especiales que puedan aparecer en la aplicación general del procedimiento. Se recomienda al lector profundizar el tema en la bibliografía citada o recomendada al final del capítulo.

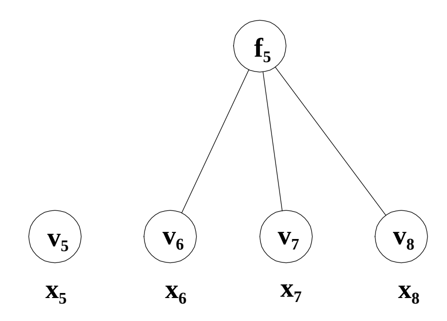


Figura IV.35: Grafo luego de eliminar f_4 y v_4.

Sólo mencionaremos a modo de ejemplo, que el uso de matrices para modelar el problema permite introducir varias mejoras en el procedimiento. Para ello se introduce el concepto de matriz de ocurrencias, la cual es manipulada hasta lograr una matriz tridiagonal (Book y Ramirez, 1976), con un esquema similar al ya discutido.

Es interesante remarcar que la forma de representar el problema no sólo facilita su resolución, sino que además, puede o no facilitar la programación computacional. Como veremos más adelante, todos los criterios de particionado, rasgado y ordenamiento de sistemas de ecuaciones son muy importantes para la implementación de un simulador.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

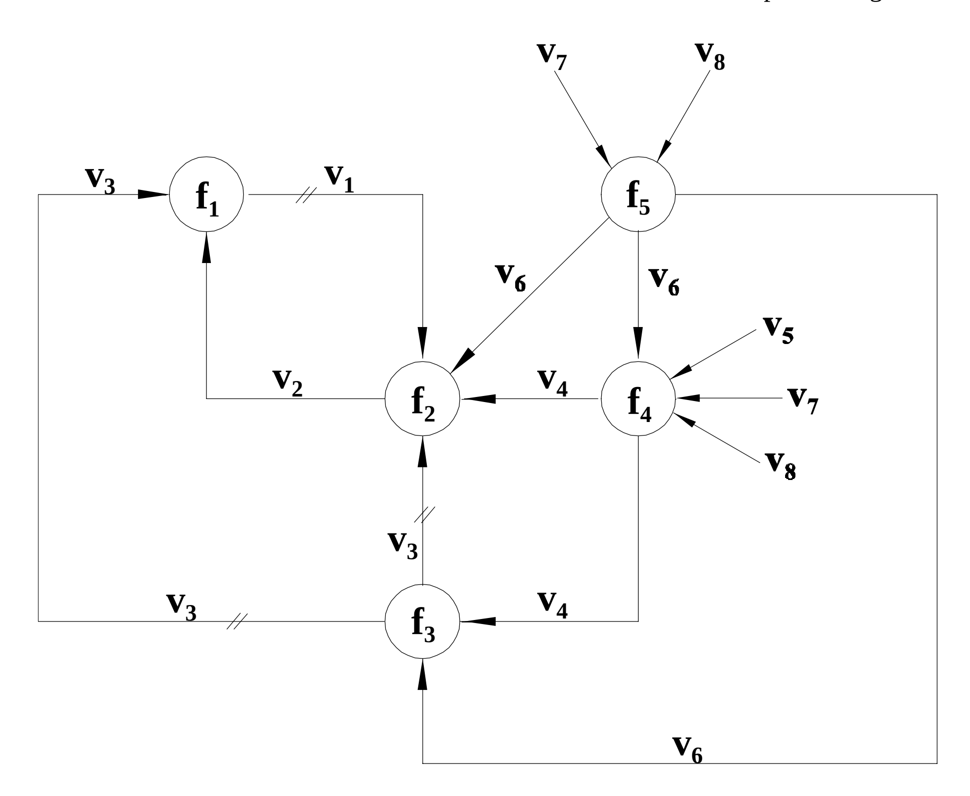


Figura IV.36: Secuencia de resolución del Sistema de Ecuaciones (40). El símbolo ≠ significa variable de corte o iteradora.

IV. 4 ALGORITMOS DE PARTICIONADO, RASGADO Y ORDENAMIENTO. ARQUITECTURA MODULAR SECUENCIAL

Llegado a este punto, nos interesa plantearnos la utilidad de los métodos discutidos y su relación con un simulador de procesos. Como fuera que éste al fin y el cabo consiste en un sistema de ecuaciones, la relación resulta obvia. En efecto, una planta completa tendrá asociada, como veremos más adelante, a miles de ecuaciones y variables. Un simulador que responde a la filosofía de representar a todo el proceso a simular por un único sistema de ecuaciones se conoce como de arquitectura global u orientado a ecuaciones. Bajo esta arquitectura, todo lo discutido hasta aquí es directamente aplicable; en particular la selección de las variables a especificar para que el sistema resulte compatible y las metodologías de particionado en subsistemas para su posterior resolución, no recurriéndose a la linealización (rasgado) de los mismos para reemplazar los procedimientos de resolución simultánea por cálculos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

secuenciales ecuación a ecuación en una secuencia iterativa.

Cada estrategia dependerá del caso particular, los objetivos perseguidos, la forma de plantear el modelo etc. Debe destacarse, no obstante, que los algoritmos discutidos al permitir representar el *estado* del sistema mediante matrices, permiten fácilmente su implementación computacional, de tal manera de automatizar el procedimiento de resolución.

Por otra parte, conviene remarcar que al existir un gran número de alternativas posibles, el problema tiene una gran flexibilidad y puede resultar apropiado para tomar decisiones, contar con conocimientos intrínsecos y/o específicos del sistema a resolver. Esto puede realizarse mediante sistemas inteligentes que complementan los algoritmos hasta aquí estudiados, de tal manera de mejorar su performance, tomando ventajas de características específicas del particular problema a resolver.

Expuesto el problema más general, conviene en este punto aclarar que históricamente, al implementarse los primeros simuladores, no se recurrió a la filosofía o enfoque global, sino que se utilizó una alternativa conocida como arquitectura modular secuencial. No discutiremos las ventajas o desventajas de ambas alternativas ni las particularidades específicas, ya que volveremos sobre este punto en los Capítulos V y VI. Nos basta con destacar que la estrategia modular secuencial, que básicamente interpreta al complejo a simular como una unión de subunidades o módulos específicos, llamados equipos (correspondientes con las operaciones unitarias clásicas), matemáticamente la podemos interpretar como un *particionado* del sistema de ecuaciones de la planta completa en subunidades (subsistemas), pero no guiados por un criterio de optimización (algoritmos estudiados en las secciones anteriores), sino por la *conveniencia* física de disponer datos y submódulos estructurados de una manera dada, dictados prioritariamente por la correspondencia de los subsistemas de ecuaciones con las subunidades de proceso (operaciones unitarias), por ejemplo bombas, intercambiadores, torres, etc, y por el sentido en que están conectadas en el proceso real.

Al forzar la partición del sistema global en subsistemas, se pierde gran parte de la flexibilidad original, sacrificando seguramente alternativas óptimas de particionado. Es el precio a pagar por utilizar una *guía no matemática*, pero conveniente desde el punto de vista físico o de ingeniería. Esquemáticamente, cada módulo o paquete de ecuaciones correspondientes a cada equipo puede ahora ser representado según la Figura (IV.37). En otras palabras, se supone que podemos construir el modelo de una unidad de proceso por medio de un sistema de ecuaciones, y que conocemos las variables (generalmente asociadas a las corrientes físicas) de entrada, siendo el objetivo el cálculo de las variables (corrientes) de salida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

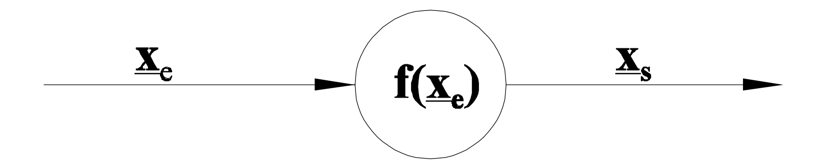


Figura IV.37

En la figura anterior se indica que, dados los valores de las variables de entrada, $\underline{x}_e$, se obtienen los valores de las variables de salida, $\underline{x}_s$ por medio de las funciones $f(\underline{x}_e)$. Nótese que nada se especifica acerca de cómo internamente se procede a la resolución, esto es, si se utiliza un método iterativo, si es una secuencia acíclica, etc. Se supone que se han aplicado a nivel local (a cada módulo; por ejemplo, el indicado en la Figura (IV.37)) todos los procedimientos vistos, de tal manera de optimizar la secuencia de resolución, fijados los $\underline{x}_e$. Obviamente, como ya se comentó, esta solución será sub- óptima, ya que si en vez de fijado $\underline{x}_e$ se hubiese adoptado algún otro conjunto entre todos los posibles, existe la posibilidad de hallar una solución más adecuada, ya que el óptimo sólo se encuentra a partir de un análisis que considere todas las posibilidades.

Dada una planta, compuesta por diversos equipos conectados entre sí, todos representados por su correspondiente sistema de ecuaciones (supuesto que conocemos las entradas y calculamos las variables de salida), podemos suponer para un caso específico, un esquema como el indicado en la Figura (IV.38):

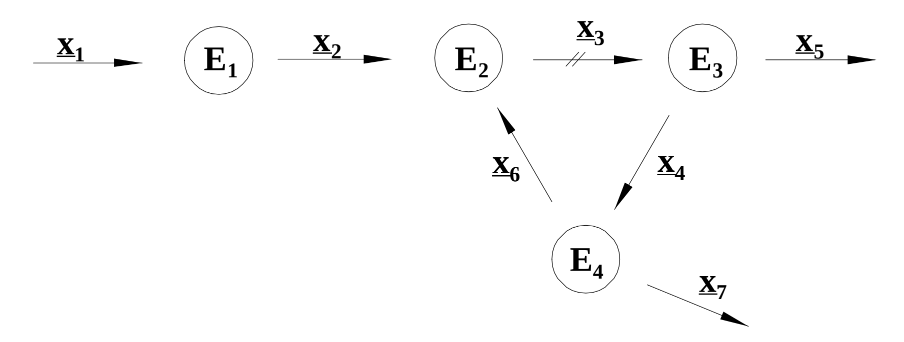


Figura IV.38: Diagrama de flujo de información (DFI) o de vinculación entre variables de entrada y salida para cada módulo (equipo) para un proceso dado.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En él se indican con valores (E_i) los nodos que representan equipos, mientras que los vectores $\underline{x}_i$ indican variables de entrada o salida de los respectivos módulos. En simulación de procesos se suele llamar al vector de variables *corriente*, ya sea de entrada o de salida, en alusión a las corrientes físicas del proceso. Se supone que para cada equipo se conocen las variables correspondientes a las corrientes de entrada (variables especificadas) y que las variables contenidas en las corrientes de salida serán calculadas. A un nodo pueden ingresar o salir más de una corriente. La cantidad de variables asociadas a cada corriente dependerá de las características de la misma.

Si analizamos la Figura (IV.38) vemos que para poder resolver el proceso completo (todas las variables de salida e intermedias), ya que las de entrada por definición se suponen especificadas ($\underline{x}_1$ en este caso), se deberá recurrir a rasgar el grafo (corrientes iteradoras) según lo indicado en la Figura (IV.38). Nótese que tanto $\underline{x}_3$ como $\underline{x}_4$ o $\underline{x}_6$ pueden ser asumidas como *corrientes o grupo de variables de iteración*. Si bien en este caso la selección ha sido sencilla (también lo es darse cuenta que en este caso el conjunto mínimo de *corrientes iteradoras* es unitario), no resulta lo mismo para un grafo de decenas de equipos y cientos de corrientes con muchos reciclos. A la relación entre nodos y corrientes esquematizada en la Figura (IV.38) se le llama, como mencionamos antes, *diagrama de flujo de información* (DFI).

Por otra parte, existen varios algoritmos propuestos que permiten encontrar el mínimo conjunto de corrientes de corte, según se analizará en detalle en las próximas secciones.

Debemos recalcar aquí que en este problema, esto es, el particionado específico del sistema global de ecuaciones (por ejemplo, el de la Figura (IV.38)) en subconjuntos de ecuaciones específicas (los representados por E_1, E_2, E_3, E_4) orientados según un sentido de cálculo tal que se suponen especificadas las variables asociadas a las corrientes de entrada, debiéndose calcular las contenidas en las corrientes de salida, no puede asegurarse una performance óptima con respecto al particionado por medio de los *algoritmos anteriormente vistos* aplicados al problema original. Esto surge como consecuencia de una asignación histórica que se orienta según los módulos de equipos o bien las relaciones físicas en el proceso, contrariamente al *flujo de información matemático* inherente a las relaciones entre las variables y funciones, según la estructura del sistema. Es por ello comprensible que a la primer estrategia, esto es, encarar el problema global y particionar el sistema en subsistemas con un criterio que da prioridad a la estructura del sistema de ecuaciones se lo llama *orientado a ecuaciones*, mientras que al otro se lo llama *orientado a módulos* o simplemente modular. Dado que los módulos se suponen orientados y deben resolverse según una secuencia, se lo denomina *criterio modular secuencial*. En los Capítulos V y VI veremos las ventajas y desventajas asociadas a ambas alternativas para encarar la simulación de un proceso.

Volviendo al esquema de la Figura (IV.38) vemos que una posible secuencia de resolución sería la siguiente (conocemos las corrientes de entrada a la planta, o sea

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{x}_1$, y suponiendo conocido además el valor de la corriente $\underline{x}_3$ - valor supuesto -):

$$\underline{x}_3 \xrightarrow{E_3} \underline{x}_5, \underline{x}_4$$

$$\underline{x}_4 \xrightarrow{E_4} \underline{x}_7, \underline{x}_6$$

$$\underline{x}_1 \xrightarrow{E_1} \underline{x}_2$$

$$\underline{x}_6, \underline{x}_2 \xrightarrow{E_2} \underline{x}_3^*$$

Luego, se comparan los valores $\underline{x}_3$ y $\underline{x}_3^*$, hasta lograr, mediante un proceso iterativo, que el error entre los mismos satisfaga un criterio especificado, por ejemplo:

$$\| \underline{x}_3^* - \underline{x}_3 \| < 10^{-8}$$

El orden de resolución de equipos (E_3, E_4, E_1, E_2) se llama *orden de procedencia o de resolución*. Las secuencias no necesariamente son únicas, como puede comprobarse rápidamente por simple inspección de la Figura (IV.38). A las corrientes iteradoras se las llama también *corrientes de corte* (en este caso $\underline{x}_3$).

Por último, al proceso de identificar los ciclos ($E_2 \rightarrow E_3 \rightarrow E_4 \rightarrow E_2$) se lo llama *particionado*. Los algoritmos que veremos a continuación permiten realizar el *particionado*, la asignación de *corrientes de corte o iteradoras* y por ende encontrar una secuencia de resolución (ordenamiento) en una forma automática y sencilla.

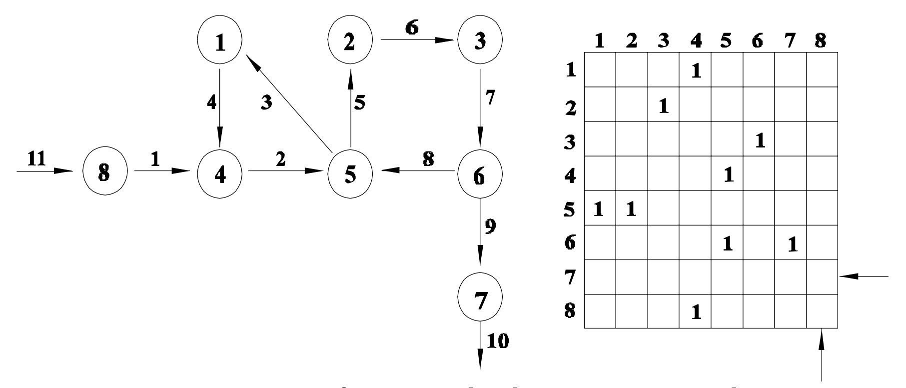
Antes de introducirnos en la problemática de referencia, repasaremos algunos conceptos asociados a la teoría de grafos que expresamos someramente en el Capítulo II.

Se denomina grafo a la representación formada por un conjunto de nodos unidos entre sí por arcos, par a par. Se lo llama *dirigido* o *digrafo* cuando los arcos están dirigidos. Además, se dice que entre un nodo N_i y N_j existe un camino, si siguiendo los arcos orientados desde N_i es posible llegar a N_j.

Por otra parte, si existe un camino tal que comienza en un nodo y termina en él, éste es llamado *ciclo* o *camino cíclico*. Un ciclo es máximo si y sólo sí todos los demás ciclos del grafo no están contenidos en él ni tampoco existen nodos en común.

IV.5 MÉTODO DE PARTICIONADO DE NORMAN (1965)

Norman se basó en la definición de la *matriz de adyacencia*, que a diferencia de la *matriz de ocurrencia*, dispone en filas y columnas los nodos del grafo (es decir que tiene dimensión igual a la del grafo). Luego, en la posición a_{ij} existirá un *uno (1)* si existe un arco entre *i* y *j* y *cero (0)* en caso contrario. Por ejemplo, en la Figura (IV.39) tenemos un grafo sencillo y su correspondiente *matriz de adyacencia*.



	1	2	3	4	5	6	7	8
1				1				
2			1					
3						1		
4					1			
5	1	1						
6					1		1	
7								
8				1				

Figura IV.39: Digrafo y matriz de adyacencia correspondiente.

Se puede notar que en la matriz aparecen filas y columnas (indicadas con una flecha) que no poseen números, esto es, están vacías. Una fila vacía, según construimos la matriz, indica que el nodo correspondiente (*7* en este caso) no es antecesor inmediato de ningún nodo. Para una columna, (*8* en este caso), significa que no es sucesor inmediato de ningún nodo. El algoritmo de Norman (1965) permite identificar los ciclos máximos por medio de la potenciación sucesiva de la *matriz de adyacencia*, $\underline{\underline{A}}$. En efecto, al multiplicar la matriz $\underline{\underline{A}}$ por sí misma, todo elemento:

$$[a_{ij}] = \sum_{i=1}^{N} a_{ik} \; a_{kj}$$

según la definición de multiplicación de matrices se obtiene acumulando los productos parciales (*k* productos). Estos productos sólo serán distintos de cero si para cada *k*, tanto a_{ik} como a_{kj} son distintos de cero, esto es, existe un camino entre ellos que los vincula.

Luego, el resultado de la operación mide la longitud del camino que une los nodos *i* y *j*. Por consiguiente, si la matriz potencia $\underline{\underline{A}}^p$ con $p = 1, 2,..., n$ presenta elementos no nulos en la diagonal, nos indica que para ese elemento a_{ii}, existen caminos que nacen en a_i y finalizan en a_i (ciclo) y además el ciclo tiene longitud *p*.

Sea el ejemplo de la Figura (IV.39). Las matrices $\underline{\underline{A}}^2$, $\underline{\underline{A}}^3$, $\underline{\underline{A}}^4$ se indican a continuación:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{A}}^2$ '

	1	2	3	4	5	6	7	8
1					1			
2						1		
3					1		1	
4	1	1						
5			1	1				
6	1	1						
7								
8					1			

$\underline{\underline{A}}^3$ '

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	1	1						
2					1		1	
3	1	1						
4			1	1				
5					1	1		
6			1	1				
7								
8	1	1						

$\underline{\underline{A}}^4$ '

	1	2	3	4	5	6	7	8
1			1					
2	1	1						
3			1	1				
4					1	1		
5	1	1			1		1	
6					1	1		
7								
8			1	1				

Aquí el problema radica en la dimensión de la matriz (que en casos reales puede ser mayor a mil) y por consiguiente el tiempo de cómputo asociado. Para solucionar este problema Keham y Shacham se basaron en las características particulares de la *matriz de adyacencia*, logrando un algoritmo eficaz y sencillo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

IV.6 ALGORITMO DE PARTICIONADO DE KEHAM Y SHACHAM

Entre las modificaciones introducidas, la primera es eliminar las filas y columnas vacías en la matriz $\underline{\underline{A}}$ descripta anteriormente, ya que no proveen información relevante. Luego se introduce una nueva matriz, la *matriz de índices* $\underline{\underline{I}}$.

Se define así una matriz de *m* filas (siendo *m* el número de elementos no nulos en $\underline{\underline{A}}$) y dos columnas. La columna de la izquierda, para una dada fila, contiene todos los nodos que dispongan de sucesor inmediato y a la derecha se coloca dicho sucesor inmediato. Esta definición también puede aplicarse a las sucesivas potencias de $\underline{\underline{A}}$. Puede apreciarse que se produce una gran reducción del espacio utilizado (memoria de máquina necesaria) sin perder información. Lo que falta es encontrar un álgebra con la *matriz de índices* similar a las potencias de la *matriz de adyacencia*. Keham y Shacham propusieron un algoritmo basado en la *matriz de índices* que logra ubicar los ciclos de igual modo que lo realiza la *matriz de adyacencia*.

Si se comparan las *matrices de índices* correspondientes a cada matriz $\underline{\underline{A}}$ potenciada, se puede lograr fácilmente un procedimiento o algoritmo práctico que permita obtener las sucesivas potencias de la *matriz de índices*.

Para tener una somera idea del algoritmo (para mayores detalles se remite al lector a la bibliografía citada o recomendada), conviene analizar las propiedades de la *matriz de índices*, $\underline{\underline{I}}$. Por ejemplo, *la matriz de índices* correspondiente a la *matriz de adyacencias* (o al grafo) de la Figura (IV.39) es:

$\underline{\underline{I}}$ =

1	4
2	3
3	6
4	5
5	1
5	2
6	5
6	7
8	4

Una segunda reducción se logra eliminando los nodos de entrada que son aquellos que no tienen antecesores inmediatos. Ello implica que en la matriz $\underline{\underline{I}}$ los valores figuran en la columna de la izquierda y no aparecen en la columna de la derecha. En caso contrario, aquellos que figuren en la columna de la derecha pero no en la izquierda no tienen sucesores, razón por la que se los llama *nodos de salida* y pueden eliminarse. Luego de ese proceso, la *matriz de índices reducida* $\underline{\underline{I_r}}$ queda:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{I_r}}$ =

1	4
2	3
3	6
4	5
5	1
5	2
6	5

Luego de este paso que ha eliminado información irrelevante se computan las sucesivas potencias de $\underline{\underline{I_r}}$ (que pueden obtenerse a partir de las matrices $\underline{\underline{A}}$ potenciadas). Un algoritmo para obtenerlas directamente es el siguiente:

- En la matriz $\underline{\underline{I_r}}$ se procede de la siguiente manera: Se toma cada elemento de la columna izquierda y se lo escribe nuevamente en la columna izquierda de la *matriz potencia*, por ejemplo, $\underline{\underline{I_r}}^2$
- En la columna de la derecha se ubica el nodo procediendo de la siguiente manera: Se debe hallar en $\underline{\underline{I_r}}$ el nodo sucesor inmediato, esto es, el valor en la columna derecha.

Por ejemplo, en el caso $\underline{\underline{I_r}}^1 \rightarrow \underline{\underline{I_r}}^2$ se tiene en la primer fila el nodo 1, que tiene a la derecha (sucesor) el valor *4*. En las columnas de la izquierda, *4* aparece una sola vez y tiene como sucesor (derecha) el valor *5* en $\underline{\underline{I_r}}^1$. Luego, se ubicará este valor a la derecha, en $\underline{\underline{I_r}}^2$, en la primer fila. Para el caso de la cuarta y quinta fila en $\underline{\underline{I_r}}^2$, vemos que se repite el *nodo 4*. Esto se debe a que en la cuarta fila de $\underline{\underline{I_r}}^1$ tenemos el *nodo 4* con su sucesor inmediato (fila derecha) el *nodo 5*. Luego, al ubicar los nodos sucesores inmediatos de *5*, esto es, en la columna izquierda de $\underline{\underline{I_r}}^1$ y tomar el nodo que lo acompaña en la fila derecha, vemos que el *nodo 5* está dos veces, en la quinta y la sexta fila con nodos sucesores *1* y *2*, respectivamente. Por lo tanto, en $\underline{\underline{I_r}}^2$ se ubicarán en la cuarta y quinta fila el *nodo 4* en columna izquierda, y los *nodos 1* y *2* en la columna derecha.

Si observamos la Figura (IV.39), esto no es más que ubicar los caminos de longitud dos que nacen en el *nodo 4*, y como puede observarse son dos y llegan hasta los *nodos 2* y *1*, respectivamente.

Esta misma información puede obtenerse en $\underline{\underline{A}}^2$. Sin embargo, con este procedimiento, que consiste en ubicar cada uno de los sucesores inmediatos del nodo sucesor a uno dado, se está adicionando una longitud más (potencia siguiente de $\underline{\underline{I_r}}$); pero evitando calcular las potencias de $\underline{\underline{A}}$ que requieren más memoria (más datos a almacenar) y mayor tiempo de cómputo. Completando el procedimiento, se obtiene:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\underline{\underline{I_r}}^2$ =

1	5
2	6
3	5
4	1
4	2
5	4
5	3
6	2
6	1

Aplicamos la misma técnica y obtenemos $\underline{\underline{I_r}}^3$. Antes conviene reiterar que las filas de $\underline{\underline{I_r}}^2$ contienen la información de todos los caminos de longitud dos que se encuentran en el grafo (por ejemplo, 1 → 4 → 5). Esta es la misma información contenida en $\underline{\underline{A}}^2$. Para obtener $\underline{\underline{I_r}}^3$ se procede según vimos tomando, por ejemplo, el primer valor en $\underline{\underline{I_r}}^2$ (primer fila = *1*) y se recorren los correspondientes sucesores del nodo colocado a la derecha, en este caso *5*. Este nodo figura en la quinta fila de $\underline{\underline{I_r}}$. Allí tenemos a la derecha *1*. También en la matriz $\underline{\underline{I_r}}$ figura en la sexta fila con *2* a la derecha. Ambos pares forman parte de $\underline{\underline{I_r}}^3$, según vimos. Cuando se obtienen en una fila valores iguales en las dos columnas, esto equivale al proceso en el cual un elemento de la *matriz de adyacencias* $\underline{\underline{A}}$ tiene un uno en la diagonal o lo que es lo mismo, existe un camino que nace y termina en el nodo en cuestión. El proceso completo nos da el siguiente resultado:

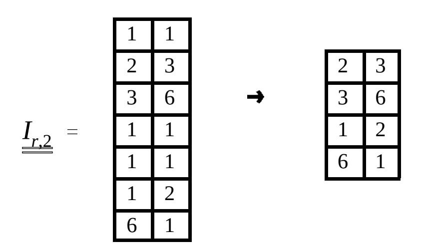
$\underline{\underline{I_r}}^3$ =

1	1*
1	2
2	5
3	1
3	2
4	4*
4	3
5	5*
5	6
6	3
6	4

Aquí obtenemos, además de los caminos de longitud *3*, tres nodos (*) que pertenecen a un camino cíclico de longitud *3*. El algoritmo prosigue luego asignando

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

los nodos a un pseudonodo (llamémosle 1) que los engloba . Luego se reemplaza en $\underline{\underline{I_r}}$ por *1* para luego iniciar nuevamente el proceso. Entonces $\underline{\underline{I_{r,2}}}$ nos queda (donde el subíndice *2* indica que detectamos un ciclo y comenzamos una segunda iteración del método):



$\underline{\underline{I_{r,2}}}$ =

1	1
2	3
3	6
1	1
1	1
1	2
6	1

➜

2	3
3	6
1	2
6	1

Los valores iguales en ambas columnas se eliminan porque no aportan información adicional. Comenzamos por eliminar nodos de entrada y salida. En este caso no existen. Luego, como se ha explicado, se obtiene $\underline{\underline{I_{r,2}^2}}$ y las sucesivas potencias:

2	6
3	1
1	3
6	2

$\underline{\underline{I_{r,2}^2}}$

2	1
3	2
1	6
6	3

$\underline{\underline{I_{r,2}^3}}$

2	2*
3	3*
1	1*
6	6*

$\underline{\underline{I_{r,2}^4}}$

Luego, encontramos en $\underline{\underline{I_{r,2}^4}}$ un ciclo de longitud *4*. Si reemplazamos los nodos por un pseudonodo, tendremos un sólo nodo en la matriz $\underline{\underline{I_{r,3}}}$, por lo que el mismo será de entrada/salida y el proceso habrá finalizado. Gráficamente podemos ver los sucesivos pasos (detección de ciclos) según la Figura (IV.40).

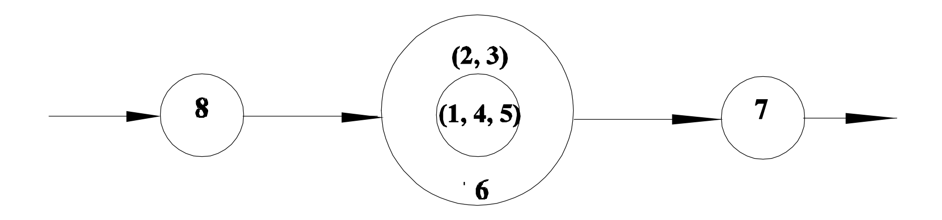


Figura IV.40: Detección de ciclos en el grafo de la Figura (IV.39).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Luego, en la Figura (IV.40) puede observarse que se obtienen los ciclos y un orden de resolución. No obstante, sabemos que para resolver cada ciclo hay que designar una corriente iteradora. El criterio para decidir una de ellas no se obtiene de este algoritmo. En síntesis, el algoritmo podría resumirse de la siguiente manera:

- Eliminar los nodos de entrada y salida (obtener $\underline{\underline{I}}_r$).
- Se calculan las sucesivas potencias de $\underline{\underline{I}}_r$. Para ello se recurre al expediente de reemplazar los sucesores de los nodos en la matriz a elevar por los sucesores de los mismos (en el grafo, o en $\underline{\underline{I}}_r$), colocándolos en la matriz resultado. Si hubiese más de un sucesor, se debe proceder para cada uno de ellos.
- Se verifican las igualdades en la matriz potencia $\underline{\underline{I}}_r^{\,p}$. Si existen *p* igualdades, se ha detectado un ciclo de longitud de camino *p*. No obstante, pueden detectarse más de un grupo de igualdades. Esto es porque puede existir más de un ciclo de longitud *p*. Las igualdades serán siempre un número múltiplo de *p*, ya que no pueden existir caminos (ciclos) detectados a esta altura de longitud distinta de *p*. Aquí cabe mencionar que pueden darse casos particulares de ciclos contenidos en otros, ciclos que compartan algunos nodos o ciclos independientes entre sí. Luego; para identificar estos ciclos especiales los autores (Norman, 1965), proponen ciertas modificaciones o estrategias específicas.
- Una vez identificado el ciclo se lo reemplaza por un pseudonodo, de tal forma de eliminar en $\underline{\underline{I}}_r$ toda referencia a los nodos individuales que lo componen.
- Con esta nueva matriz de índices se comienza el algoritmo desde el principio.
- Se aplica el mismo hasta que la matriz quede vacía.

IV.7 RASGADO DEL DIAGRAMA DE FLUJOS O GRAFO

El resultado de aplicar los algoritmos de particionado es detectar los ciclos, de tal manera de transformar el grafo original en una secuencia lineal. Esta secuencia puede tener subgrafos cíclicos. Luego, se deberá resolver cada subproblema (linealizar un grafo cíclico).

La técnica de rasgado consiste en detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser resuelto, esto es, detectar las corrientes de corte que permitan que cada subgrafo cíclico pueda ser solucionado mediante una técnica iterativa.

Asignar una corriente de corte es similar a definir una *nueva corriente* de

entrada a la planta, sólo que sus valores son supuestos y sirven para generar una secuencia que permita resolver todas las ecuaciones del sistema, tantas veces como sea necesario hasta lograr convergencia. Por ejemplo, si en la Figura (IV.39) tomamos como corrientes de corte (una por cada ciclo) las indicadas como *2* y *8* nos queda el grafo de la Figura (IV.41).

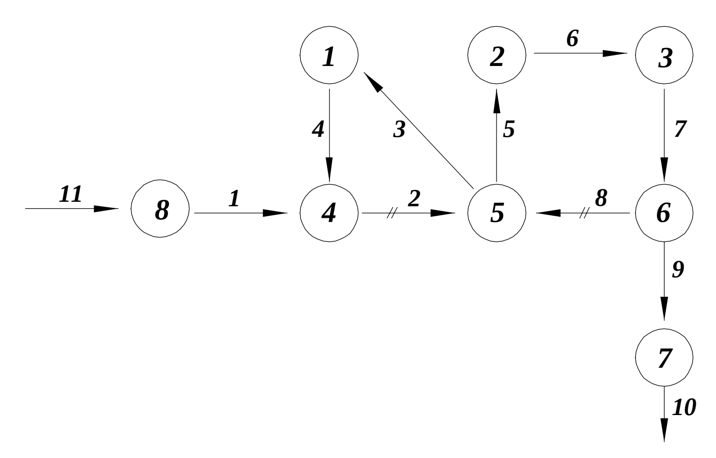


Figura IV.41: Diagrama de flujos de la Figura (IV.39) con corrientes de corte (se indican ≠) para linealizar ambos ciclos.

A partir de dichas corrientes, seleccionados los valores iniciales para el vector de variables $\underline{x}_2^i$ y $\underline{x}_8^i$ asociadas a las respectivas corrientes, se procede a calcular secuencialmente los nodos, según:

$\underline{x}_5^1$ y $\underline{x}_3^1$ del *nodo 5*, ya que disponemos del valor $\underline{x}_2^i$ y $\underline{x}_8^i$ (supuestos o iniciales).

$\underline{x}_4^1$ del *nodo 1*, ya que conocemos $\underline{x}_3^1$.

$\underline{x}_1^1$ del *nodo 8*, ya que la *corriente 11*, de entrada, se asume conocida.

$\underline{x}_6^1$ del *nodo 2*, ya que disponemos de $\underline{x}_5^1$.

$\underline{x}_7^1$ del *nodo 3*, ya que disponemos de $\underline{x}_6^1$.

$\underline{x}_8^1$ del *nodo 6*, ya que conocemos $\underline{x}_7^1$.

$\underline{x}_{10}^1$ del *nodo 7*.

Si bien obtuvimos todos los valores asociados a las variables de todas las corrientes, éstos pertenecen a la primera iteración. Debe ahora verificarse si los valores calculados $\underline{x}_2^1$ y $\underline{x}_8^1$ coinciden con los supuestos $\underline{x}_2^i$ y $\underline{x}_8^i$ dentro del margen de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

error especificado. Si lo hacen, finaliza el cálculo. De lo contario, y aplicando algunas de las técnicas vistas anteriormente (por ejemplo sustitución directa, Wegstein, etc.) se proponen nuevos valores, generando una secuencia tal que finaliza cuando se obtiene el criterio de error deseado. Nuevamente, aquí observamos que si bien es simple identificar las corrientes de corte en un grafo sencillo como el de la Figura (IV.39), no resulta equivalente analizar uno con cientos de nodos y/o corrientes. Luego, se necesita un método sistemático, implementable en computadora, que permita tal selección.

El primer problema que se presenta es encontrar un criterio con el cual guiar la búsqueda. En efecto, dado que se trata de un particionado de ecuaciones , lo lógico resultaría pensar en un criterio que miminice el esfuerzo de cálculo. De manera similar a los problemas discutidos en los Capítulos I y II, no existen tales criterios o lineamientos sin conocer en detalle el problema a resolver; por ejemplo, el número de variables asociadas a la resolución de cada nodo y corriente, el grado de dificultad asociado a la resolución de cada nodo en particular, etc. El problema es que el algoritmo debe tratar casos generales, por lo que debiéramos obtener criterios universales. Si suponemos que todas la corrientes poseen la misma cantidad de variables, es lógico pensar que debemos buscar el mínimo número de corrientes de corte para linealizar el ciclo (debido a que ello implica el mínimo número de variables iteradoras). Sin embargo, no está demostrado que un número mayor de corrientes de corte implique mayor esfuerzo de cómputo. No obstante, podemos asumir que así será en la mayoría de los casos.

Otro problema radica en conocer la certeza que tenemos acerca de la solución (o el conocimiento que se dispone del proceso que se modela) para proponer un adecuado valor inicial. Esto implica que el algoritmo debería permitir que el usuario le introduzca pesos penalizado ciertas corrientes y favoreciendo otras, de tal manera de recorrer las alternativas considerando tales criterios (recordar las funciones de evaluación discutidas en el Capítulo I).

A continuación se discutirán algunos métodos clásicos, sugiriendo ampliar el tema al lector interesado mediante la bibliografía citada y recomendada al final del capítulo.

IV.8 ALGORITMO DE BARKELEY Y MOTARD (1972)

El algoritmo propuesto por Barkeley y Motard tiene como objetivo el rasgado de los subgrafos cíclicos para obtener un conjunto de corte con el menor número de corrientes iteradoras. Este algoritmo se basa en el concepto de grafo de corrientes (S) o grafo dual al ya visto. Éste se logra intercambiando los roles, esto es, los nodos ahora son las corrientes y los arcos se obtienen a través del flujo de información en el DFI. Nuevamente, se puede hablar de corriente inmediata sucesora o antecesora, razonando ahora sobre el grafo S.

Como ejemplo, obtengamos el grafo S correspondiente al diagrama de flujo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de información de la Figura (IV.39). Para ello, el primer paso es incorporar tantos nodos como corrientes existan. Luego, se vinculan éstos según el sentido de la información que circula entre las corrientes en el grafo original. Por ejemplo, en la Figura (IV.42) se tienen ahora *11 nodos*, ya que en la Figura (IV.39) existen *11 corrientes*. Además, vemos que la *corriente 11* es antecesora inmediata de la *corriente 1* y la *corriente 1* lo es de *2*. De esta manera, recorriendo todas las corrientes y sus vinculaciones, se logra el grafo S representado en la Figura (IV.42).

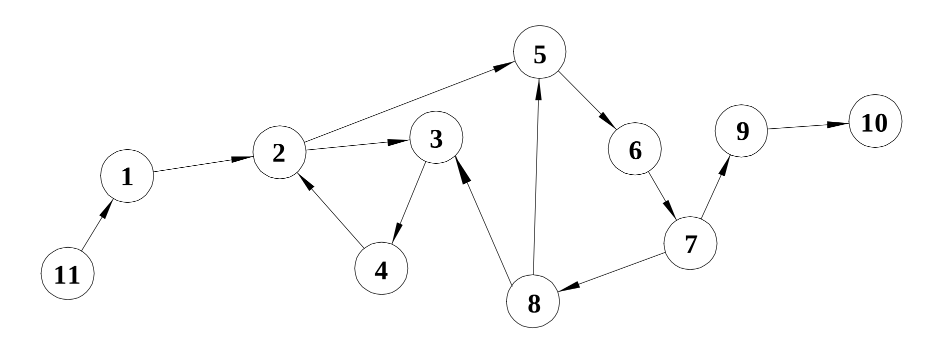


Figura IV.42: Grafo de corrientes asociado al diagrama de flujo de información de la Figura (IV.39).

Es evidente que al manipular el grafo S ahora lo hacemos sobre las corrientes (nodos), y dado que lo que buscamos son las corrientes de corte, se comprende la utilidad de la transformación del algoritmo propuesto por Barkeley y Motard.

Los autores introducen, para operar en el grafo, el concepto de *nodo dominado*. En efecto, se dice que un nodo cualquiera n_i en S es dominado por otro n_j si n_j es el único antecesor inmediato de n_i. Luego, los autores proponen un proceso de reducción de S mediante el procedimiento de englobar (engullir o fundir) los nodos dominados por sus dominantes sin perder la información en el grafo S. Por ejemplo, el *nodo 1* es dominado por el *11*, el *4* lo es por el *3* y el *7* por el *6*. Si procedemos a la reducción, nos queda el grafo indicado en la Figura (IV.43).

Como vemos, la secuencia de procedimientos es sumamente sencilla, y fácil de programar computacionalmente, dado el grafo S como dato. La forma de programación dependería de las facilidades del lenguaje a utilizar. Si asignamos pesos o preferencias a ciertos nodos, el algoritmo y su implementación computacional se complican ligeramente.

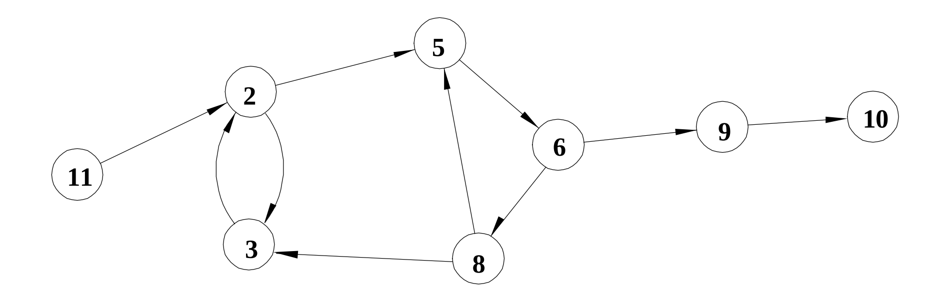


Figura IV.43: Grafo S reducido luego del proceso parcial de fusión.

Este procedimiento puede proseguirse hasta encontrar un estado en el cual un nodo se enlace a si mismo, esto es, (luego del proceso de reducción) sea dominado por si mismo. En la Figura (IV.44) se muestra el estado del grafo anterior luego de proceder a las asignaciones *10 → 9*, *9 → 6* y *8→ 6*.

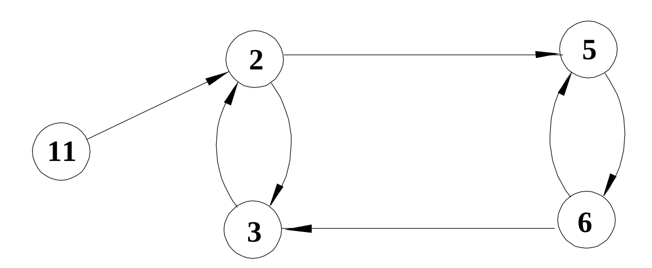


Figura IV.44

Luego, haciendo *6 → 5* tenemos la Figura (IV.45).

Vemos que no puede reducirse más el grafo S, ya que el *nodo 2* tiene más de un antecesor, el *11* y el 3. Y lo mismo sucede con *5*. Aquí se introduce un nuevo concepto, el de *autociclo*, que es precisamente la particularidad que presenta el nodo *5* que están en ciclo con él mismo, al ser antecesor y sucesor de sí mismos simultáneamente. Este hecho está íntimamente relacionado con la definición de *rasgado* o *corriente de corte*, ya que justamente, por definición de los módulos que componen el diagrama de flujo de información, cada corriente puede ser calculada sólo si se conocen las entradas al equipo (nodo) del cual sale. Traduciendo al grafo S, por la forma en que se ha obtenido, si una corriente forma un *autociclo*, esto

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

implica que no puede calculársela en el DFI si no se conoce su valor previamente, o lo que es lo mismo, si no se procede al rasgado del ciclo al cual pertenece.

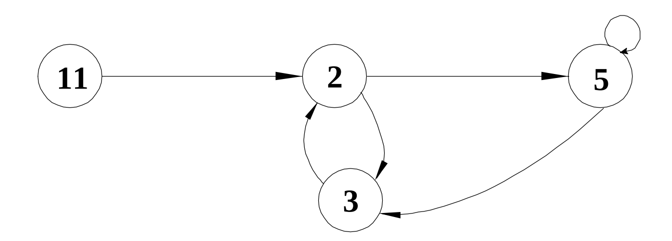


Figura IV.45

Volviendo a nuestro ejemplo, esto implica que la *corriente 2* y *5* conforman un conjunto de corrientes de corte de tamaño mínimo.

Como puede deducirse en función del proceso de reducción, no necesariamente el conjunto (*2,5*) es el único resultado, ya que se podrían obtener otros (se deja al lector la prueba). Previamente propusimos al conjunto (*2,8*) para el DFI de la Figura (IV.39), que a los efectos prácticos (asumiendo que todas las corrientes tienen la misma cantidad de variables, y no disponiendo de ninguna otra información del problema específico), resultará equivalente al conjunto (*2,5*). Obviamente una vez logradas las *corrientes iteradoras* puede proponerse una secuencia de resolución (ordenamiento) según discutimos anteriormente.

Al igual que los otros algoritmos, existen situaciones especiales o particulares que deben ser contempladas. Por ejemplo, sea la situación siguiente (ver Figura (IV.46)):

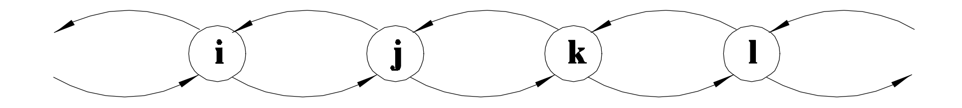


Figura IV.46: Ciclos de dos corrientes.

Aquí vemos que no existen nodos en los cuales se encuentre un único antecesor, por lo que no pueden ser reducidos (observar que la situación es distinta al caso de la Figura (IV.44)). A este caso se lo llama *ciclo de dos corrientes* y sólo puede ser resuelto (reducido) cortando una de las corrientes.

Si se presentan como en la figura, esto es, una sucesión de varios ciclos, es

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

conveniente cortar corrientes intermedias que permitan rasgar más de un ciclo simultáneamente. Esto es un principio general.

Al igual que en los otros casos, no discutiremos en detalle las particulares situaciones que puedan aparecer, dejando la inquietud para quien desee profundizar este tema a través de la bibliografía recomendada. En forma resumida el algoritmo consiste en los siguientes pasos:

- Reducción de los nodos del grafo hasta detectar *autociclos* o ciclos de dos corrientes.
- Elección del conjunto de corrientes de corte, según el criterio expuesto (por ejemplo, en un ciclo de dos corrientes).

Si embargo, para su implementación computacional es conveniente trabajar con una lista que contenga la información de los nodos y sus antecesores inmediatos. Por ejemplo, esta lista para el grafo S de la Figura (IV.42) es:

Nodo	Antecesores Inmediatos
1	11
2	1,4
3	2, 8
4	3
5	2,8
6	5
7	6
8	7
9	7
10	9

En la lista, los nodos con un sólo antecesor inmediato son *1*, *4*, *6*, *7*, *8*, *9*, y *10*. Por equivalencia al proceso de fusión del dominado por el dominante, se eliminan de la lista los menciondos nodos, reemplazando los mismos por sus dominantes. En este proceso conviene no considerar las corrientes de entradada.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodo	Antecesores
2	11, 3
5	2, 5
3	2, 5

Vemos que la lista o tabla anterior se corresponde con la Figura (IV.45), mostrando la utilidad del procedimiento, hasta aquí empleado. Luego, se explora si existen en la lista nodos que estén en autociclo. El nodo *5* cumple con esta condición (figurando a la izquierda y derecha en la misma fila). Se selecciona el nodo *5* como corriente de corte *ya que aparece en ambos*. Luego se lo elimina de la tabla.

Nodo	Antecesores
2	2

Al eliminar *2* (autociclo), nos queda la lista vacía y las dos corrientes de corte; coincidiendo a su vez con los resultados ya obtenidos anteriormente.

IV.9 ETAPA DE ORDENAMIENTO

Una vez obtenidos los ciclos y rasgados éstos, debe ordenarse el conjunto de nodos en la forma en que serán resueltos. En general, con la información que proveen los algoritmos ya vistos (los subgrafos cíclicos y las corrientes de corte que los linealizan), es posible por inspección en las listas disponibles (pasos intermedios en cada algoritmo) ordenar los nodos según la secuencia de resolución que imponen las corrientes iteradoras selecionadas.

No entraremos aquí en el detalle de programación de dichos algoritmos. Sólo basta mencionar que resultan de una combinación de los ya analizados , con ciertas modificaciones prácticas.

Ejemplo:

Sea el diagrama de flujos indicado en la Figura (IV.47), que corresponde al proceso de la Figura (IV.48). Se desea conocer cuántas y cuáles corrientes iteradoras deberán utilizarse, considerando que el conjunto de corrientes de corte sea mínimo.

En la Figura (IV.48) se denotan con un triángulo los nodos que provienen de sumar o dividir corrientes , sólo para remarcar que los mismos deben estar presentes cuando se representa a la planta en el DFI, ya que sus ecuaciones *no deben eliminarse* del problema. Respecto al tratamiento, estos nodos son equivalentes obviamente a los anteriormente analizados, por lo que deben procesarse de la misma manera que lo indicado en los ejemplos anteriores.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

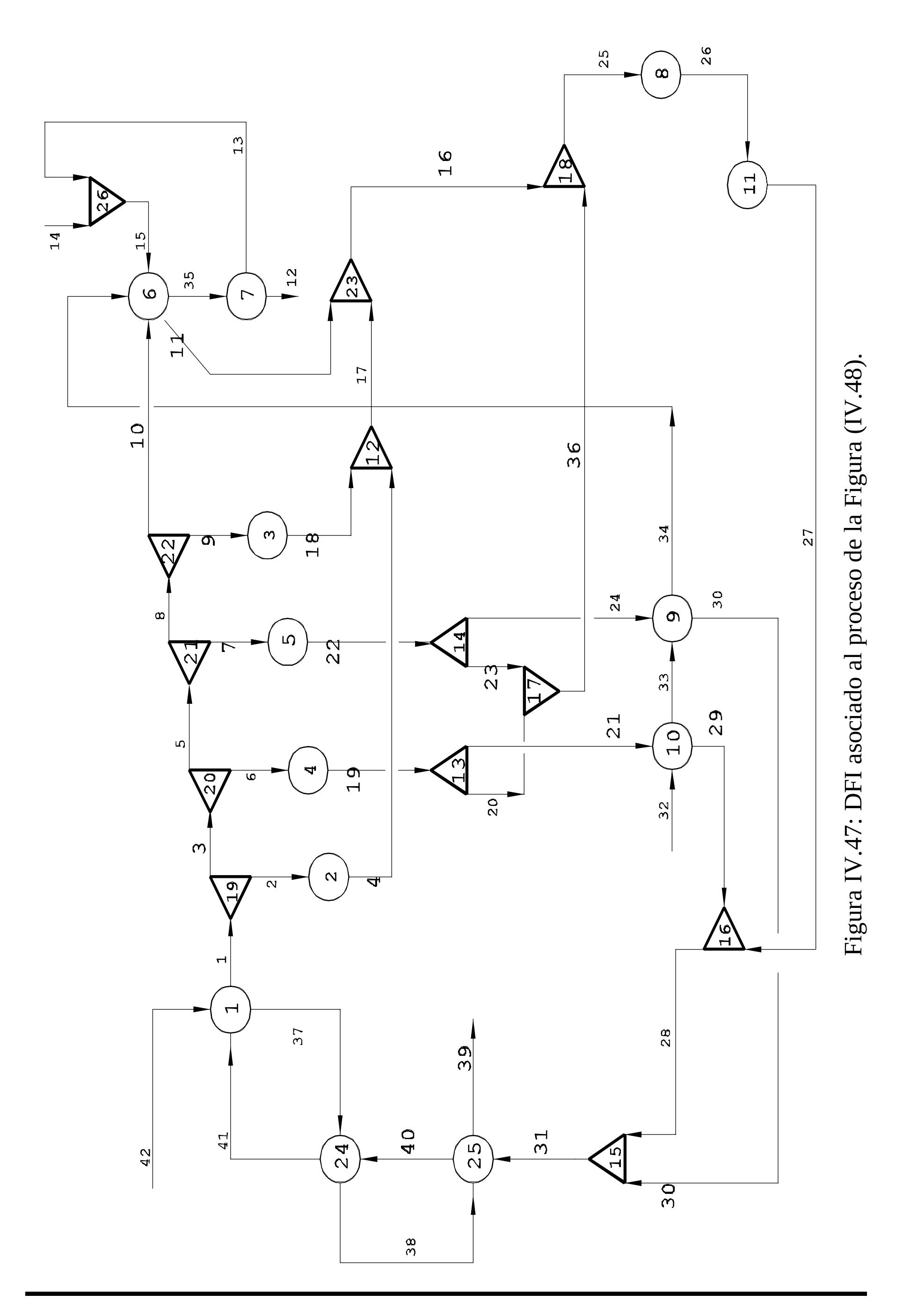


Figura IV.47: DFI asociado al proceso de la Figura (IV.48).

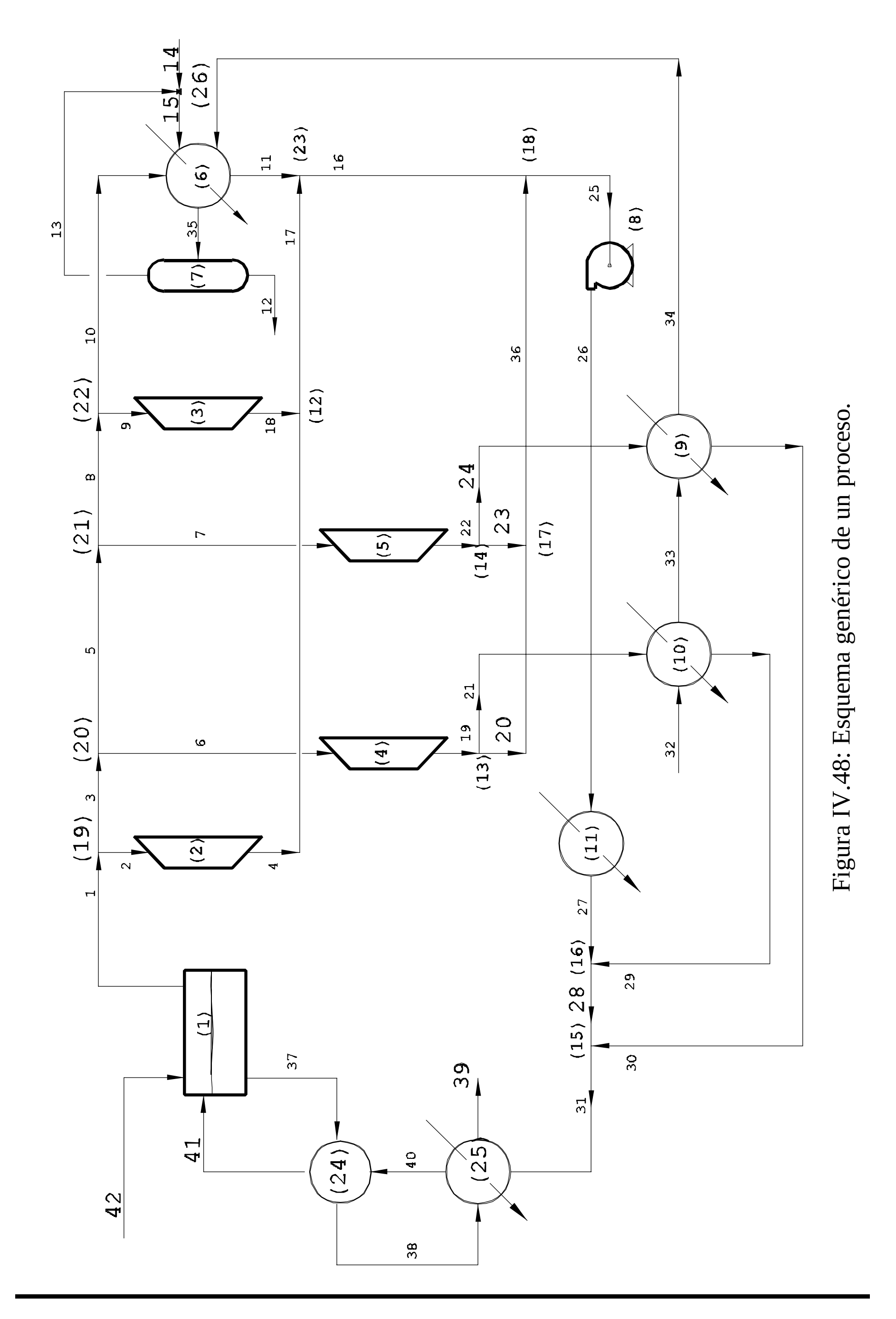


Figura IV.48: Esquema genérico de un proceso.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A continuación, sólo se mostrarán los pasos del algoritmo más significativos:

Tabla de Nodos y Predecesores

Nodos	Predecesores		
1	41		
2	1		
3	1		
4	2		
5	3		
6	3		
7	5		
8	5		
9	8		
10	8		
11	10	15	34
13	35		
15	13		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Se comienza con el método de reducción que consiste en reemplazar el

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

nodo que solamente tenga una corriente predecesora por su predecesora. El nodo que se reemplaza por su predecesor luego se elimina de la tabla. Por ejemplo, se comienza reemplazando *1* por *41* y eliminando el nodo *1*. De esta manera los nodos *2* y *3* (los únicos nodos que contienen a *1*) pasan a ser dominados por *41*. Así, eliminando *2* por *41*, luego *3* por *41* y procediendo sucesivamente de esta forma, se llega a la siguiente tabla o matriz:

Nodos	Predecesores		
1	**41**		
2	**41**		
3	**41**		
4	**41**		
5	**41**		
6	**41**		
7	**41**		
8	**41**		
9	**41**		
10	**41**		
11	41	15	34
13	35		
15	13		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

→

Nodos	Predecesores		
11	41	35	34
13	**35**		
15	**13**		
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	41	34	15
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

que luego de reducir *13* y *15* por *35*, resulta:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores		
11	41	35	34
16	11	17	
17	18	41	
18	41		
19	41		
20	19		
21	19		
22	41		
23	22		
24	22		
25	23	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	21		
30	24	33	
31	30	28	
33	21		
34	33	24	
35	***41***	***34***	***35***
36	20	23	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Se puede observar que se encuentra la corriente *35* que forma parte de un autociclo, entonces ésta resulta ser una corriente de corte. Se elimina de la tabla y se continúa con la reducción. A continuación pasamos a reducir el nodo *18* por *41*, luego *19, 20, 21, 22, 23* y *24* por *41*; luego de lo cual resulta:

Nodos	Predecesores		
11	41	34	
16	11	41	
17	**41**	**41**	
18	**41**		
19	**41**		
20	**41**		
21	**41**		
22	**41**		
23	**41**		
24	**41**		
25	41	16	
26	25		
27	26		
28	27	29	
29	41		
30	41	33	
31	30	28	
33	41		
34	33	41	
36	41	41	
37	41		
38	37	40	
40	38	31	
41	40	37	

Eliminando los nodos antes reducidos y reduciendo los nodos *26* y *25* se obtiene:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores	
11	41	34
16	11	41
25	41	16
26	**25**	
27	**25**	
28	25	29
29	41	
30	41	33
31	30	28
33	41	
34	33	41
36	41	41
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Siguiendo con el proceso de reducción:

nodos	predecesores	
11	41	34
16	11	41
25	41	16
28	25	41
29	**41**	
30	41	41
31	30	28
33	**41**	
34	41	41
36	41	41
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Resultando:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nodos	Predecesores	
11	41	41
16	11	41
25	41	16
28	25	41
30	**41**	
31	41	28
34	**41**	
36	41	
37	41	
38	37	40
40	38	31
41	40	37

Luego, se obtiene:

Nodos	Predecesores	
11	**41**	
16	**41**	**41**
25	**41**	**41**
28	**41**	**41**
31	**41**	**41**
36	**41**	
37	**41**	
38	41	40
40	38	41
41	***40***	***41***

Aquí aparece la corriente *41* como corriente de corte. Finalmente:

Nodos	Predecesores
38	**40**
40	38

→

Nodos	Predecesores
40	***40***

Luego, un conjunto de corrientes de corte para el ejemplo analizado resulta: (*35*, *41*, *40*).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Obtenga la solución del siguiente sistema de ecuaciones:

$$2\ x_1^2 + 3\ x_2^2 + 5\ x_3^2 + \ln\ (x_1^2 + x_2^2) = 0$$

$$x_1^2 + 5\ x_2 + 3\ x_3 - e^{x_1} = 0$$

$$4\ x_1^2 + 3\ x_2 + 5\ x_3^2 - e^{(x_1^2 + x_3^2)} = 0$$

Por los métodos de Newton-Raphon y Wegstein.

P2) Obtenga la solución del siguiente sistema (previamente represéntelo matricialmente):

$$x_1 + 2\ x_2 = -1$$

$$3\ x_1 + 4\ x_2 + 3\ x_3 = -5$$

$$5\ x_2 + 3\ x_3 - x_4 = 0$$

$$6\ x_3 + 3\ x_4 + x_5 = -1$$

$$4x_5 + 3\ x_6 = 2$$

P3) Obtenga la solución del siguiente sistema:

$$\begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 9 & 3 & 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 4 & 1 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 4 & 3 & 1 & 0 & 4 & 1 & 3 \\ 4 & 3 & 0 & 2 & 1 & 8 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 7 & 3 & 2 & 6 & 4 & 5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \\ x_7 \\ x_8 \\ x_9 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 3 \\ -1 \\ -2 \end{bmatrix}$$

P4) Mediante la matriz de adyacencia analice la causa por la cual una matriz de coeficientes de forma triangular implica una secuencia de solución acíclica.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P5) Determine el mínimo conjunto de corte para el proceso indicado en la Figura. Suponer que cada equipo indicado debe implementarse como un módulo independiente (no tener en cuenta los controladores).

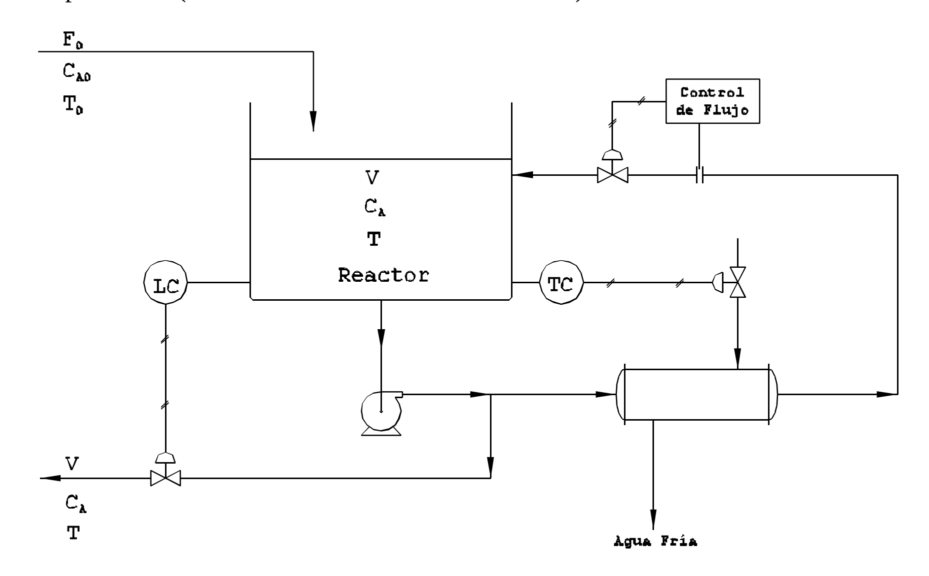


Figura correspondiente al proceso del Problema (P5).

P6) Sea el siguiente sistema de ecuaciones implícitas:

$$f_1\ (x_1,\ x_2,\ x_3,\ x_4,\ x_9,\ x_{12}) = 0$$

$$f_2\ (x_2,\ x_3,\ x_8,\ x_9,\ x_{13}) = 0$$

$$f_3\ (x_1,\ x_3,\ x_5,\ x_7,\ x_{13} = 0$$

$$f_4\ (x_8,\ x_6,\ x_5,\ x_9) = 0$$

$$f_5\ (x_{10},\ x_{11},\ x_{13},\ x_{14}) = 0$$

$$f_6\ (x_1,\ x_2,\ x_5,\ x_8,\ x_{10},\ x_{11}) = 0$$

$$f_7\ (x_1,\ x_7,\ x_9,\ x_4,\ x_8) = 0$$

$$f_8\ (x_6,\ x_8,\ x_{10},\ x_{12},\ x_{14}) = 0$$

$$f_9\ (x_{10},\ x_{11},\ x_{12},\ x_{13},\ x_{14}) = 0$$

$$f_{10}\ (x_1,\ x_5,\ x_7,\ x_9,\ x_{11},\ x_{14}) = 0$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

¿Cuántas variables deben especificarse (grado de libertad del sistema)? ¿Qué asignación resulta más conveniente? ¿Es ésta única?

P7) Sea la siguiente matriz de adyacencias:

$$\underline{\underline{A}} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

¿Cuál es el grafo que representa? ¿Tiene algún ciclo? Detéctelo mediante un algoritmo adecuado. Detecte si fuera necesario las corrientes de corte adecuadas.

P8) Mediante los métodos de Newton-Raphson y Wegstein resolver el siguiente sistema:

$$2\, x_1^2 - 3\, x_1\, x_2 + 4\, x_2\, x_3 - 5\, \ln\,(x_1^2) = 0$$

$$3\, x_4\, x_1 + 2\, x_3\, x_2 + 4\, x_1 e^{x_4} - 5\, \ln\,(x_3)\, e^{x_4} = 0$$

$$3\, x_1^4 + 4\, x_2\, x_3 - 5\, x_4 + 3\, \ln\,(x_4^2 + x_1^2) = 0$$

$$4\, x_1^3 - 8\, x_3^2 + 5\, x_3\, x_4 - 4\, x_4\, e^{x_4} = 0$$

P9) Confeccionar el diagrama de flujos de un programa que obtenga la raíz de una $f(\underline{x})$ dada para los métodos de Wegstein y de Newton-Raphson. Implementarlo en computadora. Utilizar el concepto de función o subrutina, de tal forma de lograr un programa general con mínimo esfuerzo.

P10) Confeccionar el diagrama de flujos para un programa que, dados los datos del DFI, entregue las corrientes de corte y la secuencia de resolución.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Broyden, C. G., Math. Computation, 19, 577 (1965).
- Kehat, E. y M. Sacham, Process Techn., 18, 181 (1973).
- Lee, W., J. H. Christensen y D. F. Rudd, AICHE J., 12, 6, 1104 (1966).
- Norman, R. L, *A Matrix Method for Location of Cycles of a Directed Graph*, AICHE J., 11, 450 (1965).
- Rudd, D. F. y C.Watson, Strategy of Process Engineering, John Wiley & Sons (1968).
- Steward, D.V., Soc. Ind. Appl. Math. Rev., 4, 321 (1962).
- Steward D. V., SIAM Review, 4, 321.
- Tiernan, J. C., *An Efficient Search Algorithm for Optimun Decomposition of Recycle Systems*, AICHE J., 18, 465 (1972).
- Updahye, R. S., *Selection of Decompositions for Chemical Process Simulation*, AICHE J., 21, 136 (1975).

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Amundson, N. R., Mathematial Methods in Chemical Engineering. Matrices and Their Applications, Prentice Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G. Chiovetta y G. Perez, Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora, Parte I (TomoI): Simulación de Procesos por Computadora; Agosto de 1978, INTEC, Santa. Fe, Argentina.
- Cerro, R. L., L. E. Arri, M. G. Chiovetta y G. Perez, Curso Latinoamericano de Diseño de Procesos por Computadora, Parte I (Tomo II): Simulación de Procesos por Computadora, Agosto de 1978, INTEC, Santa. Fe, Argentina.
- Westerberg, A.W., H. P. Hutchison, R. L. Motard y P. Winter, Process Flowsheeting, Cambridge University Press (1979).

CAPÍTULO V

SIMULACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

Por
Nicolás José Scenna

V.1 INTRODUCCIÓN

En los capítulos anteriores anticipamos que la simulación de procesos químicos está naturalmente vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente cantidad de movimiento; de un proceso cuya estructura, y los datos preliminares de los equipos que lo componen, son conocidos.

Además, en función del ciclo iterativo que definimos como constituyente básico de la actividad de diseño de un proceso químico, también comentamos que los simuladores de procesos son la herramienta más importante, junto a las técnicas de optimización, en la etapa de análisis. Esto es, luego de haberse generado diversas alternativas estructurales viables para un proceso dado, (flowsheets o diagramas de flujo), deberán evaluarse cada una de ellas. Ello implica el cálculo de los respectivos balances, los servicios auxiliares, etc. Con estos datos, que abarcan las propiedades de todas las corrientes del proceso, ya sean extensivas o intensivas (temperatura, presión, composiciones, estado de agregación) estamos en condición de obtener un costo estimativo, además de otros datos importantes, tales como las emisiones al medio ambiente, etc. Ello nos dará una base para discriminar entre diversas opciones posibles competitivas, o bien para verificar la performance de un diseño ya decidido, en sus etapas más finas, como ser control, confiabilidad, viabilidad de la puesta en marcha y parada, etc.

Adentrarnos en el área de la simulación de procesos en Ingeniería Química nos impone recurrir someramente a la historia de la simulación, su definición y las áreas que abarca. En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos, utilizando los fenómenos de analogía. En efecto, la teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales. Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables "equivalentes" en un circuito eléctrico (cuyo modelo es equivalente -isomorfo- al proceso estudiado), ya que son fácilmente medibles.

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evoluciona lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la primera en muchas aplicaciones.

En este libro, nuestro objetivo es desarrollar los conocimientos básicos necesarios para comprender, operar, y si es necesario desarrollar los componentes estructurales básicos correspondientes a distintos tipos de simuladores de procesos químicos. Como es conocido, la computadora se utiliza para cálculos ingenieriles hace sólo unas pocas décadas. En particular, una computadora se caracteriza simplemente por el hecho de realizar cálculos velozmente luego de ser programada. Almacena, manipula y da acceso rápido a enorme cantidad de información, permitiendo además realizar manipulaciones simbólicas. Independientemente de la forma en que esto es logrado, lo importante en nuestro caso es comprender las consecuencias; es decir, las implicancias de este fenómeno en el campo de la Ingeniería.

Si bien en 1946 se desarrolla la primer computadora electrónica operativa (la ENIAC en la Universidad de Pensilvania), recién en 1951 se presenta la primera computadora comercial. A partir de esta década se incorpora a la mayoría de las universidades de los países desarrollados un centro de cómputos.

Un hecho relevante es la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales (-personal computers- PC). Este hecho produce una revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las “autopistas informáticas” nos hablan del avance logrado.

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos precomputadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química; como da testimonio, por ejemplo, el libro de Lapidus (1962). En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, (el FLOWTRAN). A partir de allí se ha generado una sucesión de acontecimientos que permiten en la actualidad la existencia de varios y eficientes simuladores comerciales como por ejemplo SPEED UP, ASPEN PLUS, PRO II, HYSYM, HYSYS, CHEMCAD, y otros.

En las secciones siguientes se bosquejarán los principales aspectos descriptivos de un simulador apto para la simulación de procesos químicos "en general", como lo son los simuladores comerciales anteriormente mencionados. Se pondrá énfasis principalmente en aspectos genéricos y estructurales, y no en los principios de programación ni lenguajes específicos para el desarrollo del software

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

correspondiente, por considerarse dicha tarea fuera del alcance y objetivos de esta obra. No obstante, se abordarán todos los aspectos conceptuales que deben tenerse en cuenta para un exitoso desarrollo, tanto de un simulador en general (tarea harto compleja y consumidora de tiempo), como de un equipo o proceso en particular.

V.2 CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Podemos considerar a la tarea de simulación como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al simulador o programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, tales que *estiman* el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones**.**

Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (batch o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico -incluye a los equipos batch-), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc.

A continuación se expondrán brevemente las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas.

Simulación cualitativa y cuantitativa

Una de las principales diferenciaciones a realizar al analizar el enorme campo que abarca la simulación de procesos es la que nos ocupa en este apartado.

La simulación cualitativa tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado. Llamamos valores cualitativos de una variable, a diferencia del valor numérico (cuantitativo), a su signo; ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. Por lo tanto, en general se trabaja con valores tales como (+, -, 0). Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como ser análisis de tendencias, supervisión y diagnosis de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.

La simulación cuantitativa, en cambio, es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. Es a esta variante a la cual nos abocaremos en este y los próximos capítulos. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado *estacionario y la simulación en estado dinámico*.

Simulación estacionaria y dinámica.

La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

deseara estudiar o reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales (modelos a parámetros distribuidos); entonces deberá utilizarse un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Un ejemplo puede ser la variación radial de la composición en un plato en una columna de destilación, la variación de las propiedades con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc. Por lo general, en simuladores comerciales (no específicos) se utilizan modelos a parámetros concentrados y serán principalmente los analizados en esta obra.

Por otra parte, y como su nombre lo indica, la simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta en el transiente entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos a parámetros concentrados. En caso contrario, se deberá resolver un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal (parámetros distribuidos).

En este texto se pondrá énfasis tanto en la simulación de procesos en estado estacionario (Capítulos V al XII) como dinámico (Capítulos XIV al XVIII). Es importante destacar que se prevé una evolución muy importante en el campo de la simulación dinámica durante la próxima década, extendiéndose las áreas en las cuales se la utiliza normalmente. Dentro de este contexto se desarrollarán varios ejemplos de aplicación, profundizando en procesos de separación de mezclas multicomponentes por contacto en múltiples etapas en contracorriente o en procesos específicos como ser biorreactores, evaporación múltiple efecto, etc.. Se discutirá también la simulación de procesos batch (Capítulo XIX), ya que éstos representan una porción importante del campo de aplicación de la ingeniería química.

Desde el punto de vista de los fenómenos o sistemas que se estudian, la simulación puede también clasificarse en *determinística o estocástica.*

Como modelo determinístico consideramos aquél en el cual las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, es decir que no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas. En cambio en un modelo estocástico, como su nombre lo indica, ciertas variables estarán sujetas a incertidumbre, que podrá ser expresada por funciones de distribución de probabilidad. En este caso, por lo tanto, también los resultados del modelo estarán asociados a una ley de probabilidad. En esta obra estudiaremos únicamente los modelos determinísticos, dejando de lado los procesos estocásticos y la simulación de los mismos.

Por último, también debe mencionarse *la simulación de eventos discretos*, en la cual existen variables de interés que no tienen un comportamiento continuo. Existen numerosos procesos que sólo pueden simularse desde este punto de vista. Por ejemplo, la simulación o diseño de plantas batch multiproducto o multipropósito, o

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de los mismos.

Por último, también debe mencionarse *la simulación de eventos discretos,* en la cual existen variables de interés que no tienen un comportamiento continuo. Existen numerosos procesos que sólo pueden simularse desde este punto de vista. Por ejemplo, la simulación o diseño de plantas batch multiproducto o multipropósito, o ambas simultáneamente, poseen características que imponen un modelo discreto para contemplar ciertos eventos de interés. Desde este punto de vista, como se verá en el Capítulo XIX, se deberán utilizar modelos especiales para tratar funciones semicontinuas y en presencia de eventos discretos.

V.3 SIMULADORES DE PROCESOS QUÍMICOS COMPLEJOS

Debe diferenciarse la noción de un simulador general de procesos químicos de un programa de simulación de equipos o unidades operacionales aisladas. En efecto, mientras que para estas últimas sólo se requiere el modelo del equipo y un sistema de entrada/salida de datos para comunicarse eficientemente con el usuario, programar un simulador de uso general implica varios problemas adicionales.

En primer lugar deberá contemplarse una biblioteca de módulos individuales para poder simular distintas operaciones o equipos de proceso. Deberá programarse la forma de interacción de los equipos de acuerdo al flowsheet de la planta; además de la metodología de ingreso de los datos, tanto de la estructura (flowsheet) como de cada unidad individual. Obviamente, dependerá del tipo de estructura del flowsheet (con reciclos, lineal, etc) la complejidad matemática para resolver los balances correspondientes, ya que por lo general deberá recurrirse a métodos iterativos. El orden y la secuencia de cálculo dependerá de cada caso en particular, y será un nuevo aspecto a tener en cuenta en la programación del simulador. En resumen, deberán utilizarse métodos numéricos para la resolución de sistemas de ecuaciones no lineales tanto algebraicas como diferenciales (Capítulos III, IV y XIII), como así también técnicas de rasgado, particionado y ordenamiento (Capítulo IV).

Por otra parte, los aspectos vinculados a los cálculos de estimación de propiedades fisicoquímicas son bastante diferentes si se plantea el problema de un equipo dado procesando una mezcla determinada o bien un sistema generalizado capaz de simular diversos procesos de separación (por ejemplo mezclas ideales, no ideales, etc.). En este caso, deberá contarse con un sistema de estimación de propiedades generalizado, lo cual implica un problema de una magnitud muy importante. En efecto, deberá tener aptitud para calcular las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas (viscosidad, densidad, capacidades caloríficas, entalpías, constantes de equilibrio, etc.) tanto para sustancias puras como para mezclas. Particularmente dificultoso resulta el cálculo de propiedades tales como coeficientes de difusividad en mezclas líquidas, o bien las constantes de equilibrio en mezclas no ideales o en presencias de electrolitos, por ejemplo. Una introducción a los métodos de estimación de varias propiedades fisicoquímicas se desarrolla en los

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Capítulos VII y VIII.

En definitiva, son numerosos los aspectos instrumentales y metodológicos que deben superarse al diseñar un simulador de propósitos generales. Dentro de este contexto, resulta muy importante comprender esta problemática para lograr un conocimiento más profundo de la forma de operar de los principales simuladores comerciales comúnmente utilizados para la simulación de procesos químicos. Baste con mencionar que el diseño e implementación definitiva desde los primeros esbozos hasta la versión de uso comercial de un simulador típico es una tarea que involucra varios cientos de miles de horas hombre, y es además una tarea continua ya que los sistemas comerciales están incorporando constantemente nuevos métodos de resolución, o de estimación de propiedades, etc., generando nuevas versiones periódicamente.

En los puntos siguientes se tratará de describir brevemente los principales aspectos estructurales vinculados a la arquitectura de un sistema típico de simulación de procesos químicos, en forma muy general.

V.3.1 Simuladores de procesos en estado estacionario modulares secuenciales vs. Simuladores globales.

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular:

- *simuladores globales u orientados a ecuaciones*
- *simuladores secuenciales modulares*
- *simuladores híbridos o modular secuencial-simultáneo*

Bajo el enfoque de la *simulación global u orientada a ecuaciones*, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales. Como ejemplo puede citarse que en problemas típicos de simulación de columnas de destilación por métodos rigurosos el sistema de ecuaciones puede llegar a contener más de mil variables. De ello se desprende la magnitud del sistema que represente el modelo de una planta completa típica.

En la década del 70, cuando se generan los primeros simuladores, no existían los medios apropiados (principalmente hardware) para la resolución numérica de sistemas de ecuaciones de gran dimensión. Es por ello que los primeros simuladores comerciales adoptaron principalmente la arquitectura modular, en detrimento de la global.

El principal problema asociado a la filosofía de resolución global u orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las

soluciones que se encuentran. En efecto, los sistemas altamente no lineales como los que corresponden a modelos de plantas químicas pueden, por ejemplo, producir múltiples soluciones (un ejemplo será discutido en el Capítulo X, pero baste con recordar el caso de los reactores adiabáticos con reacciones exotérmicas). Además, la solución numérica para grandes sistemas, según vimos, exige inicializaciones apropiadas, es decir próximas a un entorno de la solución, de lo contrario pueden presentarse serios inconvenientes.

Históricamente, estas dificultades han sido la causa que ha limitado el desarrollo de este tipo de simuladores en forma masiva. Una de las críticas fundamentales para la operabilidad de los mismos que se realizaba a menudo por parte de usuarios no entrenados, era la imposibilidad de identificar los sectores de la planta en correspondencia con el sistema de ecuaciones que lo representa, dado que una vez que se hubo armado el sistema total, éste esta integrado y se pierde la correspondencia biunívoca entre el equipo y el subsistema de ecuaciones que lo representa. De esta manera, si existieran inconvenientes durante la simulación, resulta difícil asignar el problema a un sector específico de la planta, o bien inicializar convenientemente. Las principales características (virtudes y defectos históricamente remarcados) se resumen en la Tabla 1.

Una ventaja importante es que puede logarse una velocidad de convergencia cuadrática, esto es, mayor que en los simuladores secuenciales, como se verá más adelante. Además, dado que el sistema se plantea orientado a ecuaciones, es posible fácilmente incorporar las expresiones de restricción para definir problemas de optimización en forma directa, ya que solo basta con plantear las restricciones y la función de optimización. Esta flexibilidad es imposible en los simuladores secuenciales modulares, debido a que los módulos están orientados y definidos en forma rígida, según lo discutido en el capítulo anterior; esto es, resulta imposible agregar restricciones y/o variables, además de la expresión analítica de la función de optimización, debiéndose proceder tipo “caja negra”, según se analizará en el Capítulo XII.

Los simuladores *modulares secuenciales* se basan, según adelantamos en el capítulo anterior, en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta. En esta filosofía se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, topología diversas del equipo, distintas variantes, etc. Algunos ejemplos, tales como columnas de destilación, equipos de evaporación flash e intercambiadores de calor se analizarán en los Capítulos VI, IX y X por ejemplo. Dado que se puede analizar

específicamente la performance de los distintos métodos de resolución es factible lograr un modelo robusto y eficiente para cada módulo específico.

PRINCIPALES CARACTERÍSTICAS DE LOS SIMULADORES GLOBALES U ORIENTADOS A ECUACIONES
- Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
- Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineares) resultante.
- Mayor velocidad de convergencia.
- Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
- A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
- Más difícil de usar por "no especialistas".

TABLA 1

Conceptualmente, bajo esta filosofía, para cada módulo de simulación (equipos) deberá plantearse su modelo matemático. Obviamente, para encarar la solución de cualquier sistema de ecuaciones deben diferenciarse los valores conocidos y los que deben calcularse, todo esto teniendo en cuenta los grados de libertad; es decir, la compatibilidad entre el número de ecuaciones y de incógnitas, a fin de obtener un sistema con solución única. Los métodos para ello son los ya analizados en el capítulo anterior. El enfoque en la teoría secuencial modular por definición supone que se *conocen (especifican) las variables de las corrientes de entrada*, o sea las alimentaciones a los equipos, mientras que deben calcularse las corrientes de salida y los correspondientes parámetros de operación si correspondiera. Esto según comentamos, impone cierta rigidez que sacrifica, según sea el caso, la posibilidad de encontrar asignaciones tales que minimicen el tiempo de cómputo (secuencias acíclicas de resolución del sistema de ecuaciones asociado). Sin embargo esto resulta

conveniente desde otro punto de vista, ya que de esta manera se impone una dirección al flujo de información entre módulos. Por otra parte, según ya vimos para el análisis de los grados de libertad, las combinaciones posibles de especificación de variables son enormes, incrementándose en forma dramática la cantidad de módulos a disponer si se quisiera cubrir todas las posibilidades.

Por ejemplo, en los intercambiadores de calor en contracorriente si se suponen conocidas las corrientes de entrada, (esto es la presión, la temperatura, la composición y el estado de fase, - vapor, líquido o mezcla-); dado que para calcular las corrientes de salida el sistema de ecuaciones correspondientes queda determinado sólo cuando se asignan ciertos parámetros de equipo, será necesario que el usuario los asigne como datos. Según se verá en el próximo capítulo, una opción simplificada de cálculo implica la necesidad de fijar como parámetros de equipo el factor (U A), (producto del coeficiente global de transferencia y el área de intercambio).

En general, fijada la orientación en el cálculo (esto es dadas las entradas calcular las salidas del equipo), lograr que el sistema de ecuaciones sea compatible y tenga tantas incógnitas como ecuaciones no implica necesariamente una única opción, ya que debemos analizar las variables o parámetros de operación del equipo. En efecto, en la mayoría de los casos existirán varias combinaciones de valores posibles, es decir, existirán varias posibilidades de asignación de parámetros de equipos. Además, existen variantes para cada módulo que tienen en cuenta varios factores, como ser topología, -por ejemplo el número de entradas y salidas a una torre de destilación, o si hay condensadores parciales o totales-, o bien el nivel de las hipótesis realizadas (si se considera hidráulica de platos o no, pérdidas de calor al ambiente, etc).

Resumiendo, en un simulador modular se define cada módulo por un sistema de ecuaciones independiente que se resuelve de la manera óptima, subordinados sin embargo a las limitaciones que ha impuesto la especificación de variables seleccionada. Esto implica una ventaja en el sentido que se podrían utilizar progresivamente distintos niveles de cálculo dependiendo de la etapa del proyecto en la que se realiza la simulación, o bien en función de los datos disponibles hasta el momento, aprovechando el conocimiento que proviene de la experiencia y análisis del método de convergencia para cada caso en particular. No obstante, uno de los problemas que se originan es la conexión de los módulos según el proceso a simular y las rigideces que ello impone.

La representación del diagrama de flujo (flowsheet) del proceso se traduce a un diagrama similar, llamado *diagrama de flujo de información (DFI).* Este diagrama matemáticamente es un digrafo, en el cual los nodos son los módulos de equipos conectados uno a uno a través de las corrientes que los vinculan, las cuales se representan como arcos dirigidos. Estas corrientes de información por lo general coinciden con las corrientes físicas de la planta, pero no necesariamente en todos los casos. Lo mismo sucede con los equipos (nodos del dígrafo). En algunas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

oportunidades, será necesario representar un equipo real de la planta mediante la conexión de varios módulos disponibles en la biblioteca de módulos del simulador.

Por ejemplo, en la Figura V.1 se muestra un esquema de un proceso genérico y su traducción al diagrama de flujo de información, que resulta más útil para el manejo de la información, según vimos en el capítulo anterior.

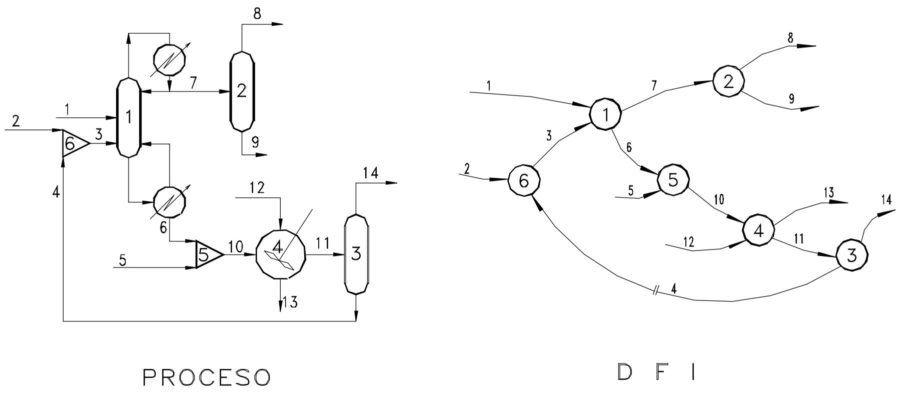


Figura V.1 "Flowsheet y DFI asociado"

En la Figura V.2 se muestra un proceso típico de desalación de aguas de mar por métodos evaporativos. El objetivo del proceso, según ya comentamos, es lograr agua potable para uso humano, agrícola o industrial. Es muy usado en zonas que no poseen fuentes de agua dulce disponibles fácilmente, según lo explicado brevemente en el Capítulo II.

Muy sucintamente recordaremos aquí ciertas características del proceso mencionando que contiene una serie de etapas conectadas entre sí, con un gradiente de presiones en el sentido de circulación de la salmuera. Esto es necesario para facilitar la comprensión del "armado" del DFI, en este caso en particular cuando se utiliza un simulador modular secuencial.

La caída de presión entre etapas permite la vaporización parcial de la corriente, cuyos vapores son utilizados para precalentar la salmuera de alimentación, a través de la batería de intercambiadores precalentadores de la alimentación. La energía externa es adicionada en el intercambiador principal, en el cual se logra la máxima temperatura de la salmuera, lista para entrar en el tren de vaporizaciones (flasheo) sucesivas. El condensado producido es el producto, el cual se colecta en las bandejas indicadas en el esquema, fluyendo también a través de las etapas (y vaporizándose) parcialmente por flasheo hasta llegar a la última etapa como producto. Las corrientes de vapor originadas se adicionan a las provenientes del flasheo de la salmuera, para formar la corriente de vapor utilizable en el precalentador de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

alimentación. En este caso, resulta poco probable encontrar en la biblioteca de módulos de un simulador comercial etapas de evaporación como las indicadas en el esquema. Por lo tanto, deberá pensarse una forma de "modelar" el proceso tratando de reproducir el comportamiento del mismo recurriendo a los módulos disponibles. Si esto no fuera posible, deberá recurrirse a la programación de un simulador específico.

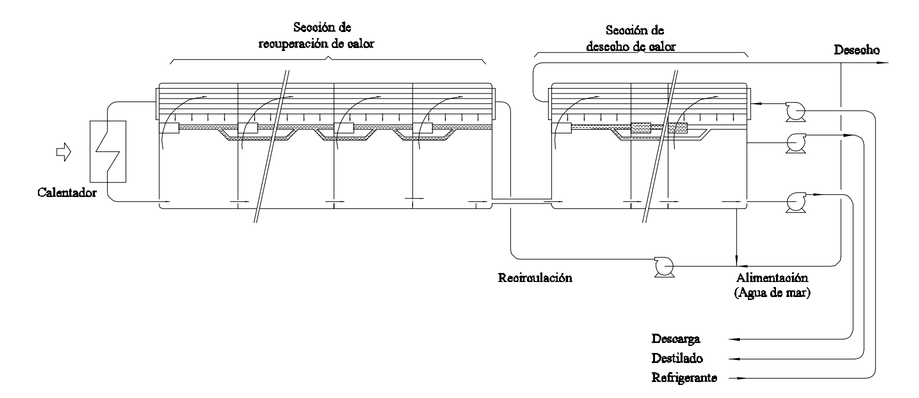


Figura V.2: Esquema de un sistema de destilación por Evaporación Múltiple Flash (EMF).

En este caso, para un estudio preliminar, es posible modelar cada etapa según lo indicado en la Figura V.3. Esto es, interpretar cada etapa de flasheo como la combinación de un equipo flash para la salmuera, un equipo flash para la corriente de condensado, un intercambiador de calor y nodos sumadores y divisores, además de equipos auxiliares (bombas por ejemplo). De esta manera, se pueden conectar los módulos mencionados en un diagrama de flujo que permitirá (dentro de cierta aproximación) calcular los balances de materia y energía de la planta real, según se indica en la Figura V.4. En este ejemplo se pretende mostrar el armado del DFI a partir de los módulos de equipos individuales, la relación entre un DFI y el flowsheet de la planta y las hipótesis subyacentes en su confección.

El problema que se plantea ahora es calcular todas las corrientes y parámetros de la planta, solucionando uno a uno los módulos en una secuencia lógica tal, que aún existiendo reciclos pueda obtenerse la solución deseada. Para ello debe utilizarse un método iterativo apropiado, definiendo corrientes de corte a través del rasgado del diagrama de flujo, según se ha visto en el Capítulo IV. Como definimos, las corrientes de corte son aquellas cuyos valores deben ser supuestos inicialmente por el usuario a los efectos de generar una serie; cuyos términos se obtengan iteración a iteración resolviendo toda la planta uno a uno los módulos, en

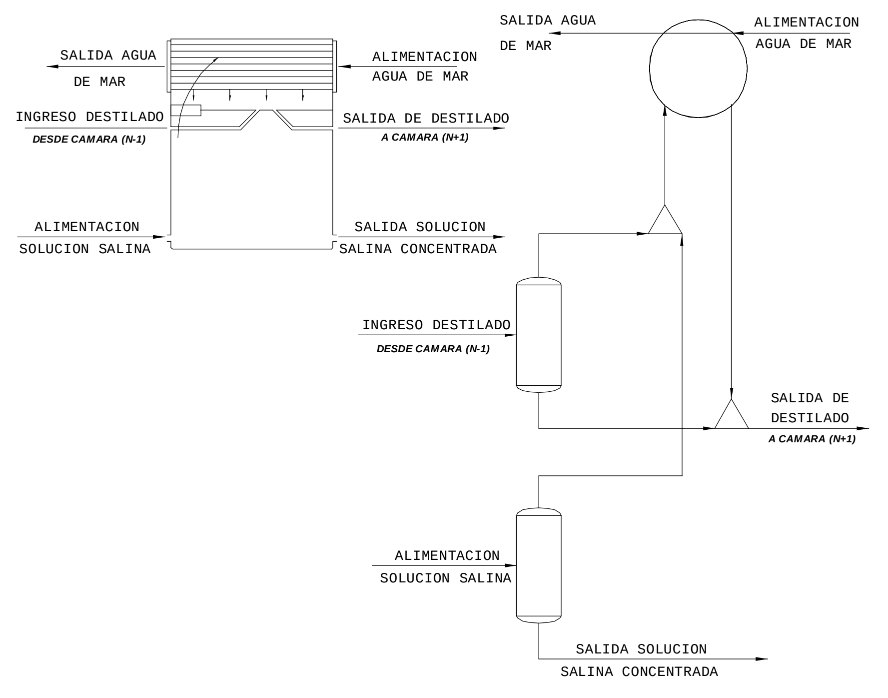


Figura V.3. Módulos asociados a cada etapa del EMF.
Construcción del DFI asociado al EMF.

una secuencia ordenada y acíclica. El criterio de convergencia estará cumplido cuando la diferencia entre los valores de dos iteraciones sucesivas es menor que un error mínimo adoptado por el usuario. En este caso se concluirá que se satisface el balance de materia y energía de la planta, con lo cual la simulación habrá terminado. Para el caso del proceso EMF se indica un posible conjunto de corrientes de corte en la Figura. V.4.

Como ya discutimos, no existe un solo conjunto de corrientes de corte, como el lector puede verificar analizando el DFI.

En síntesis, dado que en la filosofía modular, por definición los módulos resultan orientados, al construirse el diagrama de flujos del sistema, si éste contiene reciclos será necesario disponer de un procedimiento de cálculo iterativo para resolver los balances del proceso completo. Volviendo al DFI de la Figura V.4, es

evidente que debe adoptarse un criterio iterativo, ya que conociendo sólo las corrientes de entrada a la planta existen varios módulos que no pueden calcularse sin adoptar valores supuestos para ciertas corrientes. Para determinarlas (Capítulo IV) se definen las operaciones de rasgado, particionado y ordenamiento. Como sabemos, la primera identifica las corrientes que necesariamente deberán ser supuestas por el usuario, para declararlas como variables de iteración. Mediante el particionado y ordenamiento se transforma la secuencia cíclica en una acíclica o lineal, por lo que se determina la secuencia ordenada de equipos para el procedimiento iterativo de resolución.

Esto significa, sin embargo, introducir para cada corriente así definida un orden de convergencia menor al cuadrático que caracteriza a los globales . Para el caso que nos ocupa, resolver el equipo EMF en forma simultánea significa obtener un único sistema que vincule a todas las variables. Esto es muy sencillo y puede realizarse por una metodología equivalente a la utilizada para equipos de separación múltiple etapa, según veremos en los Capítulos X y XVIII.

Desde el punto de vista del análisis numérico, se puede concluir que bajo el procedimiento de la filosofía modular secuencial se introducen tres niveles característicos de iteración, a diferencia de los simuladores orientados a ecuaciones donde existe sólo uno.

En efecto, en general se debe iterar al nivel de cálculos fisicoquímicos, de módulos de equipos, y por último, a nivel del DFI o flowsheet de la planta completa. Más aún, para problemas en los cuales se defina la optimización de alguna performance del proceso expresada según una función objetivo y las variables de optimización correspondientes, se introduce un nuevo nivel de iteración, por sobre el nivel correspondiente al DFI, según se profundizará en el Capítulo XII.

En la Tabla 2 se resumen las características principales históricamente remarcadas como específicas para los simuladores modulares secuenciales.
Un paso adelante, para relajar la rigidez que impone la orientación fija, es contemplar para cada módulo todos los grados de libertad posibles. En efecto, a diferencia de la filosofía modular secuencial pura, en la cual existe una rígida estructura de los módulos, puede utilizarse un relajamiento al criterio de orientación. A modo de ejemplo, como se verá en el Capítulo IX, existen varias alternativas de asignación de parámetros y variables para un equipo flash. En efecto, no sólo es posible plantear el problema suponiendo conocida la alimentación. Además, puede asumirse conocida una de las corrientes de salida; debiéndose calcular por lo tanto las dos corrientes restantes y los parámetros operativos que surjan como grados de libertad del sistema, a fin de obtener un conjunto de ecuaciones compatible. De la misma manera puede procederse para todas las combinaciones posibles.

Esto involucra un gran trabajo de programación, ya que como comentamos anteriormente, implica aumentar drásticamente la biblioteca de módulos disponibles, pero con la ventaja de recuperar flexibilidad a la hora de plantearnos el problema de encontrar una secuencia acíclica para la resolución del DFI.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

SIMULADORES MODULAR SECUENCIALES Y SUS CARACTERÍSTICAS HISTÓRICAMENTE REMARCABLES

- Biblioteca de módulos (equipos)
- Flowsheet: Equivale a un grafo orientado o digrafo
- Orden de resolución fijo (iteraciones)
- Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar)
  1. Cálculos fisicoquímicos.
  2. Módulos en sí (ej. flash, columna, etc).
  3. Variables de iteración (reciclos).
  4. Optimización

Características Relevantes:

- Modelos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
- Métodos de convergencia robustos (Sustitución Directa, Wegstein, etc).
- La información ingresada por el usuario (relacionable con equipos o corrientes) resulta fácilmente chequeable e interpretable.
- Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más difíciles de resolver.
- Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

TABLA 2. Principales Características de los Simuladores Modulares Secuenciales.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

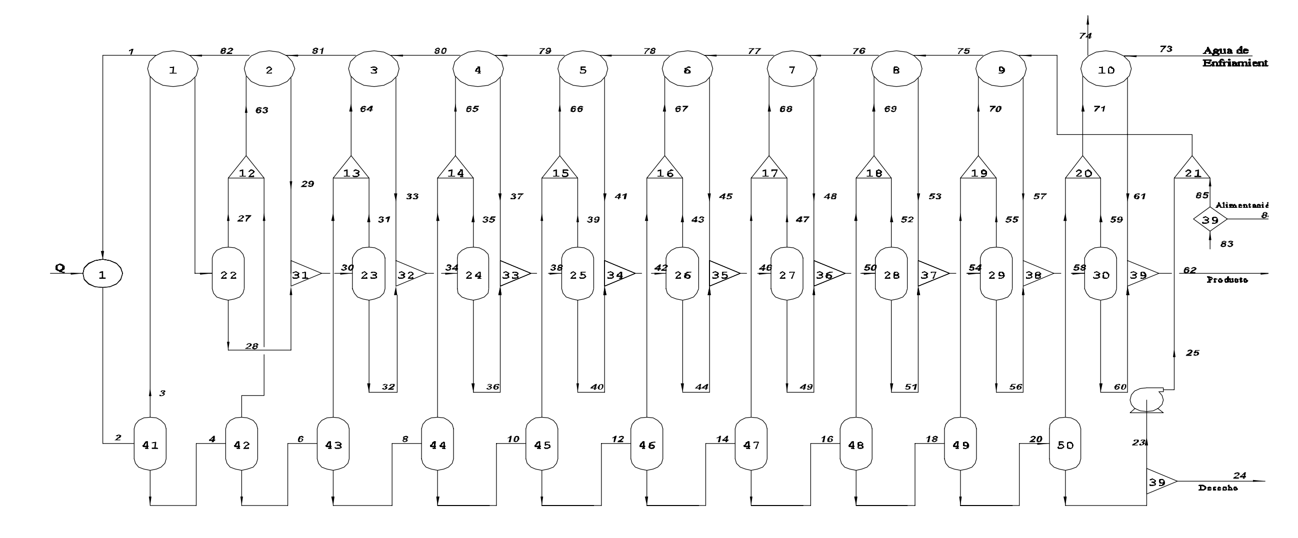


Figura V.4: Diagrama de flujo de un proceso de desalación por evaporación múltiple flash.

Dado que este planteo puede realizarse para todos los módulos, se observa que rápidamente puede crecer el "conjunto" de los mismos incrementándose en forma significativa la “biblioteca” de módulos disponibles. Esto produce un efecto inmediato en el armado del DFI, ya que el mismo, disponiéndose de nuevos módulos con nuevas orientaciones (no sólo las rígidamente impuestas por la filosofía modular secuencial pura); puede armarse ahora con nuevos grados de libertad. La primer consecuencia de esta estrategia es la necesidad de una menor cantidad de corrientes de corte, ya que se poseen más posibilidades de orientación de los módulos. El resultado es que se ha introducido un grado de flexibilización, relajando la orientación secuencial, pero manteniendo la filosofía modular. En la Figura V.5 se observa el DFI correspondiente al proceso EMF (Figura V.4) permitiendo múltiples orientaciones a los módulos. Obsérvese cómo se reduce el número de corrientes de corte al disponerse de nuevas orientaciones para los módulos (tomado de Montagna y col., 1991).

La estrategia de contemplar los grados de libertad posibles en la orientación de los módulos para mejorar la performance y flexibilidad del simulador basado en una óptica modular secuencial es utilizada por algunos simuladores comerciales para disminuir el tiempo de cómputo al reducir el número de corrientes iteradoras.

A esta altura, nos falta mencionar la tercera opción mencionada al principio de esta sección, los simuladores basados en una estrategia *híbrida* con respecto a las filosofías ya analizadas. En efecto, es posible plantear el desarrollo de simuladores combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal de aprovechar los aspectos positivos de ambas metodologías lo máximo posible. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la filosofía global, esto es, se las resolverá simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la filosofía modular, es decir, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente. Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente. Otro nombre con el que se conoce este enfoque es modular secuencial-simultáneo.

Enfocando el tema desde una perspectiva histórica, a diferencia de los simuladores globales, la filosofía modular ha sido la más desarrollada, y por ello en la actualidad la mayoría de los simuladores comerciales responden a esta metodología de trabajo. Se utilizan tanto la variante secuencial pura como métodos relajados en cuanto a la orientación de los módulos, dotándolos de mayor flexibilidad.

En este punto, resulta conveniente remarcar nuevamente, como se lo ha indicado más arriba, que esta situación ha sido una consecuencia de las limitaciones históricas en el desarrollo y potencialidades de software y hardware disponibles para resolver un sistema muy complicado de ecuaciones algebraicas, además de los recursos limitados en lenguajes de programación para construir una estructura flexible y eficiente para el modelado.

Debe aclararse, no obstante, que a la luz de las nuevas disponibilidades en hardware y software, hoy en día esta división podría relativizarse y en un futuro muy probablemente sea irrelevante.

En efecto, con el advenimiento de nuevos paradigmas de programación (que, a diferencia de los lenguajes procedurales, hacen posible el manipuleo de información simbólica, recursividad, programación orientada a objetos, etc); se logra fácilmente generar algoritmos que cumplan respecto del armado de un sistema de ecuaciones global; la misma tarea lógica que debe realizarse en un simulador secuencial para administrar los módulos parciales que representan la planta completa.

En otras palabras, es posible, tomando como dato el diagrama de flujo del proceso, diagramar una "interfaz inteligente o lógica", que "arme" el sistema de ecuaciones correspondientes a los equipos seleccionados y de alguna forma considere las interconexiones entre los mismos, a través de la identificación de las corrientes de entrada - salida como variables de conexión; elaborando de esta manera, a partir de los subsistemas, la gran matriz que representa el sistema global de ecuaciones de toda la planta. Consecuentemente, este sistema lógico (generación del sistema de ecuaciones que representa la planta completa), sería la interfaz hacia el usuario; presentaría a éste los equipos en un formalismo o lenguaje natural (como un simulador modular), mientras que hacia el simulador los traduciría en un único sistema de ecuaciones a ser resuelto. En este caso existiría una especie de banco o biblioteca de "modulos conteniendo subsistemas de ecuaciones de balance genéricas", y no módulos de equipos (ver Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo., 1990).

Además, la inicialización (el otro gran problema) podría resolverse con la misma estrategia. En efecto, las estimaciones correspondientes (por ejemplo, respecto a caudales, presiones y temperatura asociadas al tope y fondo de una columna de destilación, bombas o a intercambiadores, etc), pueden ser volcadas en forma conveniente a la inicialización del sistema global, a través de la interfaz inteligente, que presentaría al usuario "equipos" o variables con su "interpretación" física, pero hacia el simulador los traduciría en el lenguaje matemático, esto es, las variables correspondientes en el sistema global de ecuaciones asociado a la planta completa.

En definitiva, la performance del sistema en cuanto a la amigabilidad, transparencia y flexibilidad hacia el usuario, sería indistinguible respecto de uno modular. La diferencia radicaría en la estructura asociada al problema matemático y en la estrategia de resolución del sistema de ecuaciones de gran dimensión, que como sabemos tiene una velocidad de convergencia cuadrática contra una menor del sistema modular. Debe balancearse entonces velocidad de convergencia vs. robustez al resolver sistemas de ecuaciones de elevada dimensión, para optar entre una filosofía u otra. A medida que evolucionan los algoritmos y el software correspondiente para la solución de grandes sistemas de ecuaciones, mayor es la facilidad con que puede implementarse esta nueva filosofía en el diseño de simuladores de uso general. Más aún, existe en nuestros días una diversidad de productos comerciales que parcialmente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Figura V.6: Diagrama de flujo de información de un sistema EMF de 10 etapas. Según la orientación lógica dada, no existe la necesidad de utilizar corrientes de corte ya que se logró una secuencia acíclica utilizando módulos de orientación diversa.

Autor: Nicolás J. Scenna y col.
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

llevan a la práctica los principios aquí discutidos. En efecto, uno de los condicionantes es la relativa necesidad de utilizar un criterio orientado a ecuaciones al enfrentar la simulación dinámica de plantas completas. Dado que los nuevos simuladores tienden a dotar al usuario de la facilidad de simular la planta *tanto en estado estacionario como dinámico*, es conveniente para el desarrollo de estos simuladores, migrar a la filosofía global.

En este libro no tenemos como objetivo específico el análisis de la evolución histórica ni las tendencias evolutivas de los aspectos correspondientes a la simulación de procesos y las filosofías y estrategias para la implementación de los sistemas informáticos que le dan soporte. Además, este mismo punto podría plantearse para los sistemas de síntesis de procesos, diseño, interacción con sistemas gráficos para la generación de documentación, la simulación cualitativa, simulación dinámica, sistemas de control, etc., haciendo imposible la recopilación en un espacio acotado como el que disponemos.

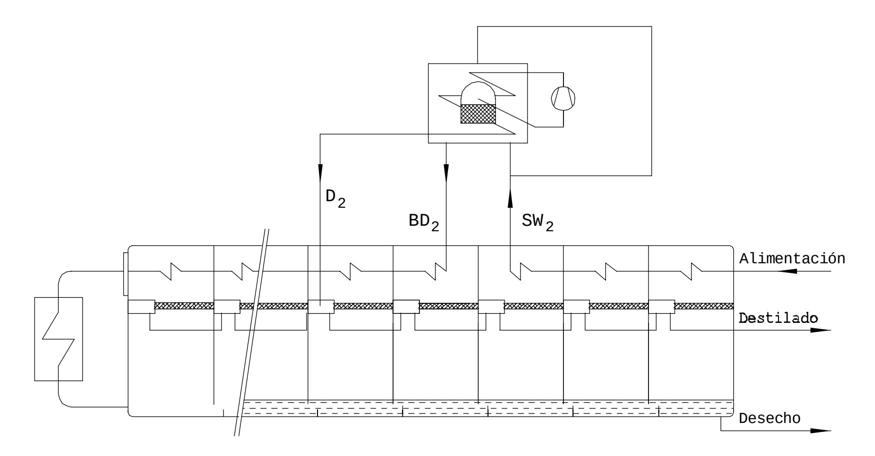
Con la introducción realizada, resultará claro al lector que en un futuro, debido al progreso del software y hardware, los modelos estarán basados progresivamente en la filosofía global u orientada a ecuaciones. Esto permitirá además mayor flexibilidad en el planteo de problemas muy diversos, como ser simulación estacionaria y dinámica, optimización, etc; todos ellos factibles de resolverse con una única herramienta, que conceptualmente, debiera llamarse de modelado de procesos más que de simulación de los mismos. Con ello se estaría enfatizando su versatilidad para ser utilizada en diversas tareas propias de la ingeniería de procesos (según vimos en el Capítulo I y II) y no específicamente simulación, en el sentido clásicamente aceptado por definición. Esto por otra parte, obliga al usuario a conocer cada vez más los detalles, tanto matemáticos como estructurales, así como también, la implementación de modelos específicos, ya que en una filosofía orientada a ecuaciones, solo implica agregar un paquete de ecuaciones adicionales a las contenidas en la "biblioteca" de módulos-ecuaciones del simulador.

PROBLEMAS PROPUESTOS

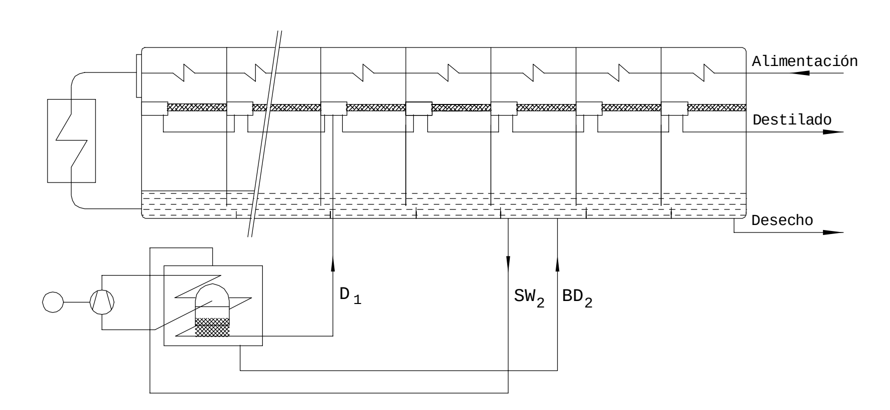
P1) Sea el procedo de desalación de aguas de mar indicado en la Figura V.4. Como analizamos en el capítulo IV, los criterios para identificar el conjunto de corrientes de corte no involucran en general una consideración de las características físicas de las corrientes, por lo que algunas pueden ser más convenientes que otras, pese a contener el mismo número de variables; por ejemplo por ser fácilmente estimadas, con relación a otras. Por otra parte, también puede suceder que una corriente tenga menor número de variables que otra, por lo cual se supone que resulta conveniente (menor esfuerzo de cómputo). Desde este punto de vista, considerar el conjunto de corrientes de corte indicado en la figura en relación con el siguiente: (3,63,64,65,66,67,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

68,69,70). Cuál es más conveniente?. Cuál es el motivo?
Existe en el diagrama un conjunto de corrientes de corte más convenientes?

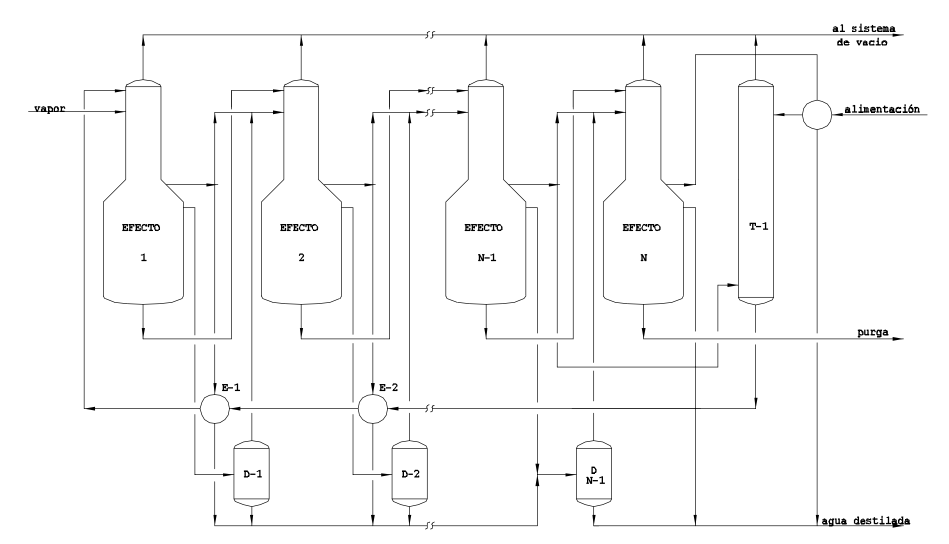



```
P2-a) Integración en paralelo de un sistema por Compresión
de Vapor (CV) a un sistema EMF.
El agua de mar es extraída de uno de los calentadores de las
etapas de flasheo para alimentarlo al equipo CV y luego
devolverlo al sistema EMF.
```




```
P2-b) Integración en paralelo CV-EMF.
El agua de mar se extrae de las cajas de flasheo del EMF.
La descarga del CV se ubica en la misma caja.  El destilado se
deposita en el conducto colector corresponiente.
```


ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



P2-c) Proceso de desalinización de aguas de mar por evaporación múltiple efecto.

Evaporador Múltiple efecto para la desalación de aguas de mar.

P2) Dados los siguientes procesos, según lo indican las respectivas Figuras, obtener el conjunto de corrientes de corte y la secuencia de resolución, modelando el sistema en función de módulos elementales contenidos en un simulador comercial (por ejemplo bombas, válvulas, intercambiadores de calor, flash, compresor, etc.). Caso P2-c). Evaporación Múltiple Efecto.
Caso P2-a) y P2-b). Procesos híbridos de desalación combinando el evaporador EMF y el basado en compresión de vapor (CV).

P3) Un simulador estacionario, puede ser utilizado para graficar la relación entre dos variables del equipo o planta a simular, por ejemplo el calor consumido vs. la temperatura del agua de alimentación en el proceso de la Figura V.2?.
Y para graficar la curva de evolución de la temperatura de la salmuera en la primer cámara ante la perturbación del calor introducido?

P4) Debido a qué motivo comienza a incrementarse en el mercado la oferta de simuladores orientados a ecuaciones?**.**

P5) Escriba un diagrama de flujo en bloques para secuenciar las tareas que debería seguir un programa que simule un complejo químico dados los equipos y corrientes (DFI) y los datos correspondientes a las corrientes de entrada a la planta y los pertenecientes a los parámetros de operación de cada equipo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P6) Debido a qué motivo un simulador comercial, si bien puede calcular un conjunto de corrientes de corte, permite también al usuario definir un conjunto propio?

P7) Cuál es la idea detrás de los simuladores híbridos o de dos niveles jerárquicos?.

P8) Explique el motivo por el cual puede encontrar múltiples soluciones cuando usa un simulador en estado estacionario. Qué condiciones debe tener el sistema de ecuaciones correspondientes al modelo?.
Nota: Recuerde el caso de los reactores adiabáticos y sus múltiples estados estacionarios.

P9) Explique la causa por la cual el DFI no necesariamente debe coincidir con la planta real.

P10) Qué tipo de modelos debería utilizar en los casos en los cuales los valores de las corrientes de entrada a la planta tienen asociados leyes de probabilidad?. Y si varían en el tiempo?. Puede ser utilizado un simulador estacionario para simular el comportamiento de una planta batch?.

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomoI): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomo II): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo.; MODEL.LA. A MODELing LAnguage for Process Engineering. Part I: The formal framework; Computers and Chemical Engineering, 14, 8, 1990.
- Henning, G., Leone, H., Stephanopoulos, Geo.; MODEL.LA. A MODELing LAnguage for Process Engineering. Part II: Multifaceted Modeling of Processing Systems; Computers and Chemical Engineering, 14, 8, 1990.
- Westerberg A.W., Hutchison H. P., Motard R.L., and Winter P., “Process Flowsheeting”, Cambridge University Press, 1979.

CAPITULO VI

INTRODUCCIÓN A LAS CARACTERÍSTICAS DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL

Por
Nicolás José Scenna

VI.1. ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO

Para comprender el desempeño de un simulador modular secuencial es necesario estudiar la estructura y la arquitectura del mismo. Básicamente podríamos diferenciar en principio tres funciones o secciones perfectamente diferenciadas:

1) *La lógica central o lógica general del simulador.*
2) *Sección encargada de la estimación de las propiedades fisicoquímicas.*
3) *La biblioteca de módulos de equipos, es decir cada uno de los módulos que representan el comportamiento de válvulas, intercambiadores, sistema de destilación, sumadores, divisores, flash, compresores, etc.*

La primer sección, es decir la lógica general o central o de administración, a su vez comprende principalmente las siguientes subsecciones:

- *La sección de entrada*
- *La sección de salida de resultados*
- *La lógica general de administración*

La lógica general de administración propiamente dicha es la que está encargada de administrar los distintos procesos que deben ejecutarse para lograr la simulación de un proceso dado. Es decir que deberá procesar el diagrama de flujos, decidir si puede resolverse en una secuencia lineal o si existen reciclos, seleccionar sobre cuáles variables deberá iterarse, determinar en función de las corrientes de corte el orden en el cual serán resueltos los equipos, etc. Esto es, deberá manipular un banco de algoritmos como los descritos en el Capítulo IV que permitan, dado el DFI de la planta, realizar el rasgado, particionado y ordenamiento o secuencia de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

resolución.

Por otra parte, al finalizar el proceso iterativo de acuerdo al criterio de convergencia definido por el usuario, procederá a detener el proceso de simulación, retener los resultados, es decir almacenar en el lugar correspondiente todos los valores convergidos de las corrientes del proceso, los valores y parámetros internos de los equipos, por ejemplo los perfiles internos de torres, composiciones, caudales, temperatura y presiones de cada etapa, etc. Si no se lograra convergencia luego de una cantidad de iteraciones previamente estipulada, la lógica central del simulador detendrá el proceso iterativo e informará al usuario, por medio del mensaje de error que corresponda. Otro mensaje de error que podría requerirse es el referido a equipos que por ejemplo, en una simulación dada, no pueden ser calculados dado que en función del tope de iteraciones interno fijado en su programa no han convergido, o por ejemplo los métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas no logran convergencia al estimar una dada propiedad durante la ejecución de una simulación, etc.

También, para facilitar la tarea del usuario, existirá un sistema de almacenamiento de información (por ejemplo un Administrador de Base de Datos), en el cual pueden almacenarse resultados de las diversas simulaciones para una misma planta, a los efectos de facilitar la presentación en forma gráfica de los resultados obtenidos, por comparación entre las distintas alternativas simuladas, si fuera necesario.

Por último esta lógica general de administración, que es el verdadero cerebro del simulador, podrá o no tener en cuenta interacciones con otros utilitarios o con otros programas. En efecto, el resultado de una simulación como sabemos, es por lo general el balance de materia y energía, es decir el valor de todas las variables asociadas a corrientes y parámetros intrínsecos de la planta como ser los servicios en los intercambiadores, las columnas de destilación, etc. Ahora bien, si durante la secuencia de tareas tendientes a obtener la ingeniería básica se necesitara efectuar el diseño de los intercambiadores (u otros equipos), se podría interactuar con el programa de diseño correspondiente, suponiendo que éste sea de alguna manera compatible con el lenguaje utilizado y la forma de almacenar los datos que dispone el simulador. En general, los simuladores comerciales disponibles tienden cada vez más a incorporar programas específicos de cálculo (intercambiadores, internos de torres, cañerías, etc) a los efectos de facilitar la integración de tareas (simulación y pre-diseño) por ejemplo.

Esta problemática, la de la integración de diversas herramientas computacionales en las distintas facetas de un emprendimiento ingenieril (ya sea en el aspecto de diseño o producción) es un campo de activa investigación. Las grandes áreas informáticas aplicadas a procesos productivos (CAM-Computer Aided Manufacturing) o CAD (Computer Aided Design) tienden cada vez más a utilizar herramientas compatibles para las distintas tareas encaradas. El área de los *sistemas*

de información aplicados a plantas de proceso trata de dar una respuesta adecuada a esta problemática, siendo enorme el esfuerzo de investigación y desarrollo que se vuelca a este problema actualmente.

Aquí, conceptualmente, sólo nos importa recordar que las tareas propias de la simulación de procesos (ver capítulo II) son una pequeña parte del problema global, al igual que las herramientas utilizadas (simuladores, programas individuales, etc). La compatibilidad de un simulador (su interacción con otros programas tales como herramientas de síntesis de procesos, planillas de cálculo, programas de diseño de intercambiadores, tanques, piping, etc), es un aspecto crucial para evaluar la herramienta computacional bajo el punto de vista de su utilidad en el uso cotidiano en las actividades ingenieriles.

En cuanto al sistema de entrada/salida de datos, es una parte fundamental de todo simulador de uso general. En efecto, deberá caracterizarse por su flexibilidad y amigabilidad al usuario. En este campo mucho se ha ganado con la introducción en el mercado de productos tales como el sistema windows, que permite disponer de un menú de ventanas sumamente cómodo para la introducción de datos y la interacción general usuario-simulador. Por otra parte, los sistemas gráficos han permitido una fácil implementación de los programas de carga de datos, reemplazando los primitivos ficheros por sistemas estructurados de entrada que, en general, permiten la opción gráfica, es decir, presentar esquemáticamente el flowsheet de la planta remarcando el equipo acerca del cual se introducen los datos requeridos.

Estas ventajas también se notan en la fase de presentación de resultados. En efecto, la potencialidad que brindan los entornos o ambientes mencionados facilitan enormemente la presentación de curvas y gráficas y el acceso a la información específica necesaria (parámetros de equipos, datos fisicoquímicos, etc).

Por último, es conveniente destacar que los sistemas de ingreso de datos se programan de tal manera de facilitar a un usuario inexperto, o poco conocedor del tema, un fácil uso del sistema. Más aún, se tratan de chequear al máximo las inconsistencias o errores en la introducción de datos, a los efectos de minimizar el tiempo gastado inútilmente al emprender tareas de simulación. De esta manera, la sumatoria de fracciones molares distintas de la unidad, las temperaturas absolutas negativas, valores inconsistentes dentro del contexto del problema, grados de libertad violados al especificar parámetros de equipos, etc., son inmediatamente notificados al usuario por medio de un sistema de validación que emite mensajes de error o advertencia.

Sistema de Estimación de Propiedades Fisicoquímicas

En un simulador de procesos de alcance general, el sistema de estimación de propiedades fisicoquímicas es prioritario. Dado que se deberán simular diversos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tipos de mezclas, de comportamiento ideal y no ideal, sistemas bifásicos y/o trifásicos, potencial presencia de electrólitos y/o sólidos, constantes de equilibrio en reacciones químicas, etc; resulta indispensable disponer de un banco de modelos para la estimación de un número importante de propiedades fisicoquímicas en todas las situaciones mencionadas. En efecto, debido a que los cálculos ingenieriles involucran diversas propiedades tales como conductividades térmicas, capacidades caloríficas, viscosidad, densidad, difusividad, constantes de equilibrio, etc.; tanto para sustancias puras como para mezclas de diversa índole, se comprende la magnitud de la tarea si se pretende contar con un sistema adecuado. Por lo general los simuladores comerciales siempre disponen de la opción de permitir al usuario incorporar sus propias correlaciones ante el caso de ausencia de métodos adecuados para el cálculo de alguna propiedad en un caso particular.

Por ejemplo, si se pretende confeccionar un programa computacional que calcule un intercambiador de calor para dos fluidos (agua-alcohol), los métodos más apropiados para la estimación de las propiedades fisicoquímicas, al igual que los datos necesarios, están definidos. Sin embargo, si pretendemos hacerlo más general, deberá existir asociado un banco de datos que permita estimar las propiedades fisicoquímicas necesarias para una inmensa variedad de fluidos. Esto implica un banco de modelos de estimación y uno de parámetros para utilizarlos, no solo para componentes puros, sino para mezclas, que obviamente, son potencialmente un número muy grande.

La confección de un sistema como el descrito es sumamente laboriosa, e implica no sólo la programación de los distintos métodos existentes, ya que debe además contemplarse la interacción con los diversos programas de cálculo de equipos (módulos), la incorporación de parámetros y el uso independiente de los mismos por programas de cálculo de equipos específicos provistos por el usuario, la generación de curvas de variación de la propiedad calculada con respecto a variables de interés como ser temperatura, presión y composiciones; con la posibilidad de presentar los resultados gráficamente, según diversos parámetros de interés, etc.

A continuación se indicarán brevemente los principios generales sobre los que se sustentan la mayoría de los métodos de estimación de propiedades incorporados a los simuladores de propósito general, en particular la constante de equilibrio y la entalpía de mezclas multicomponentes.

Constante de equilibrio en mezclas no ideales

En general se utiliza en el modelado de problemas que involucran equilibrio líquido-vapor el concepto de relación (o constante) de equilibrio, según la siguiente expresión:

$$K_i = y_i \;/\; x_i \qquad (1)$$

Donde i indica cada componente en la mezcla, esto es, i = 1, 2, ...NC. Esta ecuación

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

puede extenderse al equilibrio líquido-líquido, conociéndose como coeficiente de reparto.

Para expresar K_i en función de parámetros termodinámicos, debemos recurrir a las relaciones clásicas de dicha disciplina. En lo que sigue se expondrán someramente algunas relaciones básicas, suponiendo que el lector posee una formación adecuada en el tema.

En una mezcla multicomponente, la energía libre de Gibbs se define como una función del tipo:

$$G = G(T,\ P,\ n_1,\ n_2\ ,\ ......\ n_{NC})$$

Luego, el diferencial total de G es:

$$dG = (\partial G/\partial T)_{P,n_i} dT + (\partial G/\partial P)_{T,n_i} dP + \sum_i^{NC} (\partial G/\partial n)_{P,T,n_{j \neq i}} dni \qquad (2)$$

De la termodinámica clásica, cada derivada parcial de la expresión anterior puede demostrarse que son iguales a otras funciones termodinámicas de interés:

$$(\partial G/\ \partial T)_{P,n_i} = S; \quad (\partial G/\ \partial P)_{T,n_i} = V; \quad (\partial G/\ \partial n_i)_{P,T,n_{j \neq i}} = \mu_i$$

que substituyendo en (2) nos da:

$$dG = -S\ dT + V\ dP + \sum_i^{NC} (\mu_i\ dn_i) \qquad (3)$$

En un sistema en equilibrio, el diferencial de la ecuación anterior se anula.

Por otra parte, si consideramos en un sistema cerrado en equilibrio con dos fases, a presión y temperatura constantes, el planteo para cada fase, de la ecuación anterior; y considerando que para ambas fases debemos igualar a cero la expresión obtenida (equilibrio), es fácil demostrar a partir de dicha igualdad que (en un sistema en equilibrio) debe cumplirse:

$$\mu_i^V = \mu_i^L \qquad (4)$$

Donde los supraíndices indican fase vapor y líquida respectivamente.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El problema es cómo calcular μ_i. Para un gas ideal puede demostrarse que:

$$\mu_i = R\ T\ \ln\ (P)\ +\ f_i(T) \tag{5}$$

donde f_i (T) es una función de la temperatura.

Para contemplar mezclas multicomponentes reales, (Lewis,1901) introdujo el concepto de fugacidad, o presión modificada, definida como:

$$f_i = f_T\ (T)\ \exp\ (\mu_i\ /\ RT) \tag{6}$$

donde f_T está relacionada con f_i *(T)* de la expresión (5).

A partir de estas ecuaciones puede demostrarse que también debe cumplirse en el equilibrio la siguiente expresión:

$$f_i^L = f_i^V \tag{7}$$

Dado que la fugacidad está íntimamente relacionada con la presión, a través de las desviaciones del comportamiento de la mezcla respecto del ideal, se introducen coeficientes de fugacidad, que por ejemplo para la fase líquida se expresa:

$$f_i^{(L)} = \varphi_i^{(L)}\ x_i\ P \tag{8}$$

y para la fase vapor:

$$f_i^{(V)} = \varphi_i^{(V)}\ y_i\ P \tag{9}$$

Por otra parte, para representar la desviación de la actividad (que es la relación entre la fugacidad f_i de una mezcla y su fugacidad en cierto estado estándar , por ejemplo la fugacidad de la especie pura f_i^0 a la misma presión y temperatura) de una mezcla con respecto a su comportamiento ideal, se introducen los llamados coeficientes de actividad (γ_i) según:

$$a_i^L = \gamma_i^L\ x_i \tag{10}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$a_i^V = \gamma_i^V \; y_i \qquad (11)$$

$$a_i = f_i / f_i^0 \qquad (12)$$

De las ecuaciones (8) (9) (10) (11) (12) y (1) pueden obtenerse expresiones diversas para la constante de equilibrio en mezclas multicomponentes (K_i). Una de las más utilizadas es aquella que surge de tomar (y_i) de la ecuación (9) y x_i de la ecuación (10), según:

$$K_i = \frac{\gamma_i^L \; f_{i,L}^0}{\varphi_i^V \; P}$$

mientras que si se utilizan las ecuaciones (8) y (9) se obtiene:

$$K_i = \frac{\varphi_i^L}{\varphi_i^V} \qquad (13)$$

Cualquiera sea la expresión utilizada, el problema radica en calcular los respectivos coeficientes, que en mezclas multicomponentes no ideales son función, en el caso más general, de la temperatura, la presión y las composición de la mezcla, tanto en el vapor como en el líquido.

En el capítulo VII se analizarán algunos de los métodos más conocidos para estimar los coeficientes respectivos, con vistas al cálculo de la constante de equilibrio. No obstante, con lo planteado hasta aquí es fácil observar que para el desarrollo de cualquier simulador genérico, debemos encontrar algoritmos que permitan, dados unos pocos parámetros y datos de los componentes puros, calcular los valores correspondientes a la constante de equilibrio en la mezcla, dadas la temperatura, presión y composición de la misma. Si no se dispusiera de esta herramienta, para cada caso en particular, debería plantearse un modelo específico, lo cual implicaría de hecho la imposibilidad de un alcance genérico.

Entalpía de mezclas no ideales

Al igual que para la constante de equilibrio, para la entalpía debemos encontrar modelos de cálculo apropiados y suficientemente generales. Dado que el problema radica, al igual que en el caso anterior, en el cálculo asociado a las mezclas no ideales, la determinación de los coeficientes de fugacidad y actividad resulta nuevamente un paso obligado. En efecto, para un gas ideal se tiene:

$$H_v^0 = \int_{T_0}^{T} Cp_v^0 \, dT \qquad (14)$$

Para una mezcla multicomponente se recurre a la conocida ley de aditividades

$$H_v = \sum_{i=1}^{NC} y_i \, H_{iv}^0 + (H_v - H_v^0) \qquad (15)$$

donde el último factor de calcula según:

$$H_v - H_v^0 = P_v - RT - \int_{\infty}^{v} [P - T \, (\partial P / \partial T)_v] \, dv$$
$$= - R \, T^2 \, (\partial \ln f_v \, / \, \partial T)_P \qquad (16)$$

donde aparece la corrección que introduce la fugacidad.

Las expresiones anteriores pueden calcularse fácilmente si se disponen de ecuaciones de estado (P-V-T) para la evaluación de las derivadas parciales e integraciones indicadas. Dado que algunas ecuaciones de estado también describen adecuadamente la fase líquida, pueden emplearse expresiones similares a las anteriores para el cálculo de la entalpía en la fase líquida. En este caso sin embargo deben introducirse los factores que tengan en cuenta la corrección por presión, cambios de fase, etc. En efecto, para el caso de la fase líquida tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$H_L = H_v^0 + (P_{vs}) - RT - \int_{\infty}^{v_{vs}} [(P - T(\partial P/\partial T)_v] dv -$$
$$- T(\partial P/\partial T)_s (v_{vs} - v_{Ls}) + (P_{V_L} - P_{v_{Ls}}) - \int_{v_{Ls}}^{v_L} [P - T(\partial P/\partial T)_v] dv \qquad (17)$$

donde el primer término es la entalpía del gas ideal a presión cero, el segundo, tercer y cuarto término conforman la expresión que toma en cuenta la corrección de presión desde cero hasta la presión de vapor de saturación (equilibrio líquido-vapor), el quinto término tiene en cuenta el calor latente de vaporización, y por último los restantes términos tienen en cuenta la corrección por presión en la fase líquida, desde la presión de saturación hasta la presión de la mezcla.

Las ecuaciones (16) y (17) son útiles cuando se dispone de una ecuación de estado, en especial aquellas explícitas en la presión P = f (V, T), de tal forma de facilitar los cálculos de las integrales expresadas, que se realizan reemplazando las expresiones analíticas correspondientes y resolviendo las integrales y derivadas resultantes. Por otra parte, cuando la fase líquida no puede representarse adecuadamente por los métodos anteriores, o bien cuando se disponen de los valores de los coeficientes de actividad, es útil recurrir a las relaciones que a partir de la termodinámica clásica relacionan las propiedades molares parciales de exceso y los coeficientes de actividad o fugacidad. En efecto, podemos escribir para la entalpía de exceso molar parcial:

$$\overline{H}_i^L - H_i^L = \overline{H}_i^{L,E} = - R\,T^2 \,(\partial \ln \gamma_i^L / \partial T)_{P,\,x_i} \qquad (18)$$

en donde el segmento sobre la entalpía molar (H_i^L) indica propiedad parcial, y el supraíndice L,E implica propiedad de exceso, o desviación con respecto al comportamiento ideal.

Por lo tanto, a partir de las ecuaciones (16) (17) y (18) se puede escribir:

$$HL = \sum_i^{NC} x_i \,(\, H_{vi}^0 - R\,T^2\,(\partial \ln\,(f_i^L)\,/\,\partial T)_P - $$
$$ - R\,T^2\,(\partial \ln\,(\gamma_i^L)\,/\,\partial T)_{P,\,x_i}) \qquad (19)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A partir de la expresión anterior se desprende que para el cálculo de las entalpías en la fase líquida debemos calcular los coeficientes de fugacidad (corrección por presión) y los coeficientes de actividad, por lo que pueden combinarse modelos PVT con aquellos que estiman los coeficientes de actividad. Por otra parte, en general resulta evidente que la misma información para el cálculo de las constantes de equilibrio es la necesaria para el cálculo de las entalpías, por lo que seleccionando un método de estimación para una es lógico utilizarlo para la otra, y las restantes propiedades necesarias. Esto es conveniente tanto desde el punto de vista del ahorro de tiempo de cómputo como para la coherencia en los resultados obtenidos.

En el Capítulo VIII se mencionarán algunos métodos para la estimación de las propiedades necesarias para calcular la entalpía, tales como la capacidad calorífica, actividades y fugacidades, etc., al igual que otras propiedades de interés, tales como conductividad, viscosidad, etc.; aunque solo desde un punto de vista introductorio; dejando al lector interesado la inquietud de consultar otras obras, recomendadas al final de los Capítulos VII y VIII.

En síntesis, todo simulador genérico, tanto para simulación dinámica como estacionaria, necesita un banco de datos (parámetros fundamentales de las sustancias puras y de interacción entre pares binarios por ejemplo) y un banco de modelos (para estimar las distintas propiedades, por ejemplo coeficientes de fugacidad y actividad, etc.). Estos dos elementos son fundamentales, y no debe desestimárselos, como generalmente sucede al encarar el estudio o desarrollo de modelos de simulación. Esto se debe a que generalmente existe en el estudiante una tendencia a interpretar “el modelo”, a partir de las ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, materia y energía; olvidando que se escriben en términos de entalpías, por ejemplo, que luego implican un “nuevo modelo” para su cálculo. Por ultimo, al trabajar en equipos de contacto, por ejemplo líquido-vapor, aparece el concepto de equilibrio o bien de transferencia de materia, lo cual nuevamente impone el cálculo o estimación de propiedades tales como los coeficientes de transporte, las constantes de equilibrio, etc. En definitiva, tarde o temprano los resultados estarán fuertemente condicionados por tales estimaciones.

Biblioteca de Módulos de Equipos en un Simulador Modular Secuencial.

Como hemos visto, a través de la simulación de procesos por computadora se resuelven los balances de materia y energía de una planta dada. En toda instalación industrial la materia prima que ingresa (corrientes de entrada en el simulador) sufre gran cantidad de transformaciones hasta alcanzar los productos deseados (corrientes de salida). Los equipos de proceso (intercambiadores de calor, torres de separación, reactores, etc.) son los responsables de las transformaciones y constituyen “la maquinaria” de la planta industrial.

En un simulador de procesos, con los módulos representativos de los equipos y fisicoquímica asociada a los mismos, se tiende a reproducir la operación real de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

planta, generando las transformaciones necesarias para alcanzar el producto deseado. La adecuada selección de las variables especificadas y de los parámetros de funcionamiento para los módulos; sus modos de cálculo y la fisicoquímica correspondiente son los responsables de la convergencia o no del sistema y del tiempo de cómputo total utilizado; y además, del grado de aproximación de los resultados provistos por el simulador al comportamiento de la planta real. Debe notarse al respecto que si bien la mayoría de los simuladores comerciales existentes poseen cierto grado de selección "automático" para algunas de las variables arriba mencionadas, (por ejemplo un sistema experto que recomienda métodos de cálculo de propiedades fisicoquímicas para una mezcla dada), *la responsabilidad de las hipótesis adoptadas, los niveles de cálculo seleccionados, y la interpretación de los resultados, será siempre una tarea exclusiva del operador del simulador, es decir el ingeniero de procesos.*

En este capítulo se analizarán los distintos pasos genéricos a seguir en la construcción de módulos de simulación de equipos en simuladores modulares secuenciales. Este conocimiento es importante para conocer los detalles de la metodología con la cual se programan los módulos de los simuladores existentes, y es básico para encarar la tarea de desarrollo de un módulo en especial. Esto último, como se ha visto, es un problema normal y bastante frecuente al encarar la simulación de procesos químicos, dado que como se ha remarcado anteriormente, la biblioteca de módulos es siempre limitada frente a la realidad y diversidad de los procesos químicos reales. Por ejemplo, los reactores, a menos que sólo baste con simularlos a un nivel elemental, siempre caerán en esta categoría, ya que son muy específicos. Además, los módulos apropiados ante cada problema en particular sólo podrán seleccionarse, con criterio y adecuadamente, si se tiene un cabal dominio de las hipótesis subyacentes en los mismos y sus implicancias.

Desarrollo de Módulos Generales para un Simulador Modular.

En general, los items a tener en cuenta para abordar el desarrollo de módulos de simulación con el objeto de utilizarlos acoplados a la estructura de un simulador de procesos de propósitos generales son los siguientes:

- *Esquema de funcionamiento de un módulo generalizado:*
  Se deben considerar las posibles variantes acerca de los distintos tipos de datos conocidos (corrientes de entrada, salidas, etc.), los grados de libertad, parámetros, filosofía de cálculo, relación con el sistema general, etc.
- *Interrelación módulo de equipo-base de datos:*
  Aquí analizaremos la descripción de la estructura general de conexión (intercambio de datos) entre el módulo de simulación (equipo) y el sistema de almacenamiento de datos del simulador (constantes fisicoquímicas, parámetros de equipos, sistema de entrada-salida, etc).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- *Selección de parámetros de equipos:*
  En este punto se describe la estructuración del módulo de acuerdo a las necesidades de la operación a simular. Esto es, definir los grados de libertad del sistema, los parámetros a fijar según los mismos, etc.
- *Niveles de cálculo:*
  En este punto se identifica la rigurosidad del cálculo que se desea (grados de simplificación).-
- *Interrelación módulo de equipo-fisicoquímica:*
  Describe el esquema que relaciona los módulos de equipos con los programas de estimación de propiedades fisicoquímicas.

El diagrama de intercambio de información entre los módulos (que representan la operación de los distintos equipos) y el sistema o lógica central del simulador poseen una estructura general como se muestra en la Figura 1.a En ésta se observa que las entradas al módulo consisten en los parámetros del equipo (que se describirán posteriormente), las variables de retención interna (por ejemplo: los perfiles de caudales, concentraciones y temperaturas de una torre de destilación para ser utilizados como variables de inicialización) y las corrientes de entrada al equipo. Además, deben incluirse en la salida los resultados del cálculo (por ej. calor total intercambiado en un intercambiador de calor) junto a las corrientes de salida del módulo, que a su vez serán datos de entrada para el próximo equipo en la secuencia de resolución.

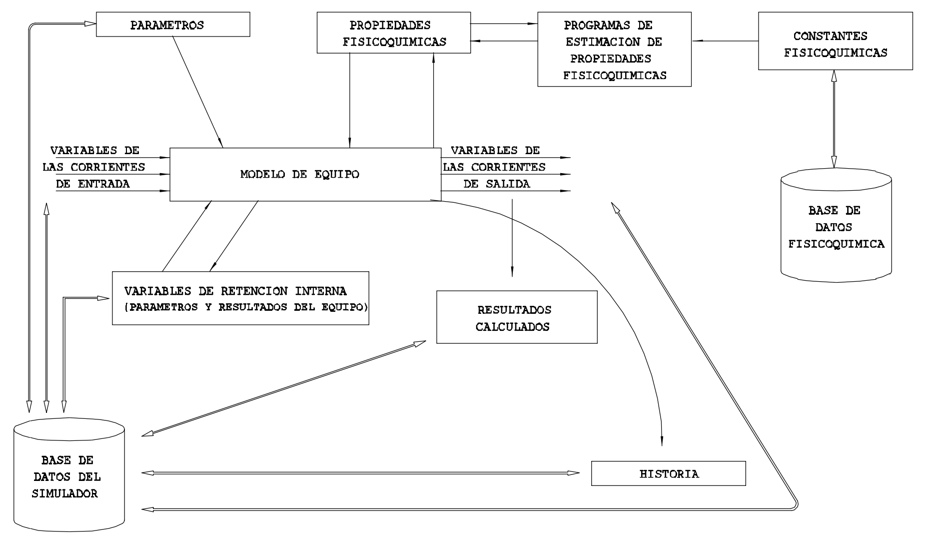


Figura VI.1.a: Arquitectura típica de un simulador genérico, modular secuencial.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

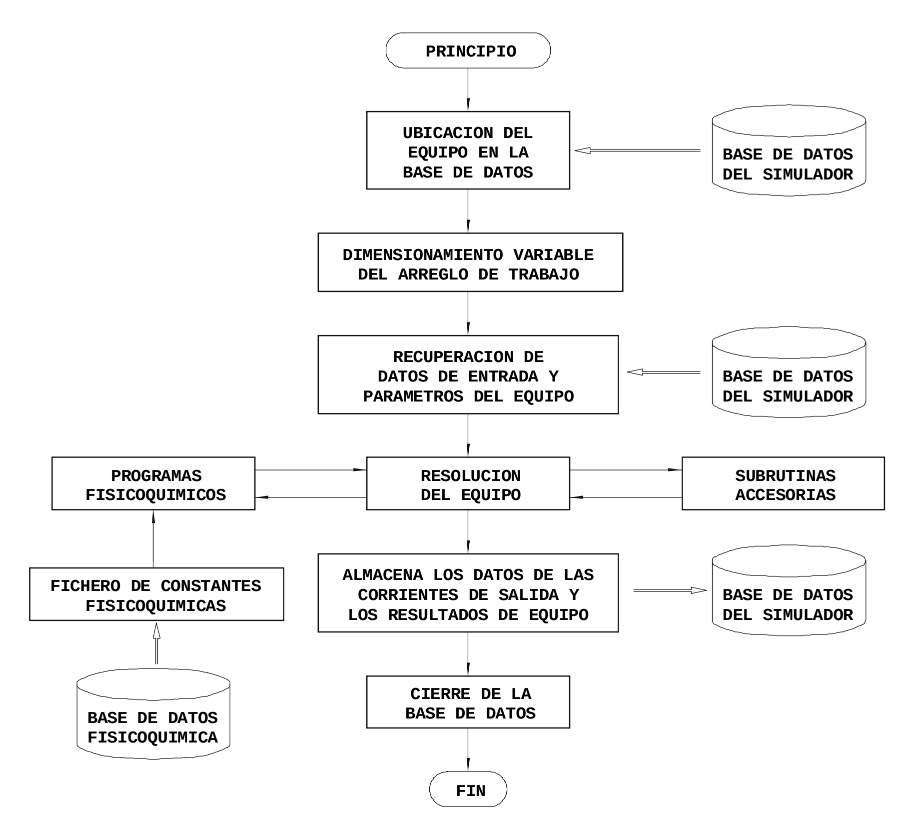


Figura VI.1.b: Esquema de cálculo de cada módulo o equipo del simulador

Este esquema tradicional responde a la simulación clásica modular, secuencial en estado estacionario. Dado que los modelos planteados para cada operación unitaria son independientes del sistema fisicoquímico a emplearse, es posible lograr generalidad y flexibilidad de programación para los módulos de equipos, solo teniendo en cuenta una forma apropiada de interacción entre las secciones que deben realizar cálculos fisicoquímicos y las encargadas de resolver los balances y relaciones funcionales propiamente dichas.

Un punto importante en la nueva generación de simuladores orientados al manejo de grandes cantidades de información es la administración y almacenamiento de la misma. En general debe definirse algún tipo de administrador de base de datos para lograr una integración entre los módulos de la lógica central, de ejecución, programas fisicoquímicos, entrada/salida de información, y el almacenamiento de los datos en sí. Las relaciones estructurales pueden consultarse en los manuales que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

se proveen con cada simulador comercial. En la Figura 1.b se observa un esquema general de funcionamiento en el que se indica el flujo de información al resolver un equipo o módulo.

VI.2 MODELADO DE EQUIPOS PARA SIMULACIÓN DE PROCESOS. PROGRAMACIÓN DE MÓDULOS DE SIMULACIÓN.

Según vimos, la resolución de un módulo de simulación de un equipo en particular significa obtener como resultados las variables de salida (y ciertos parámetros operacionales si corresponde) a partir de las variables de entrada, parámetros de funcionamiento y fisicoquímica auxiliar; en el caso de la filosofía modular secuencial pura. También mencionamos que existe la posibilidad de contemplar módulos en los cuales se relaja la orientación de las corrientes especificadas, si la arquitectura del simulador permite considerarlos en su estrategia de cálculo.

En este punto desarrollaremos una noción acerca de la tarea de lograr la estructuración de los módulos a través de un ejemplo sencillo; a los efectos de poder enfrentar con éxito la construcción de módulos específicos si fuera necesario. En próximos capítulos se profundizará en este punto.

En primer lugar conviene destacar que los módulos de simulación de equipos presentan tres características fundamentales. *El tipo o clase*, esto es la operación unitaria que representa, *la topología del mismo***,** es decir la cantidad de entradas y salidas, variantes operativas, variables adoptadas de salida, etc; esto es diferentes *variantes* del mismo equipo, y por último *la rigurosidad de cálculo***,** que implica los distintos conjuntos de hipótesis que definen el *nivel de exactitud* de los resultados provistos.

En general, los simuladores comerciales presentan una adecuada descripción de los módulos que contienen y una indicación de los métodos de cálculo que se utilizan en los manuales correspondientes. A continuación se desarrollará un ejemplo para vislumbrar los principales puntos a tener en cuenta en el desarrollo de un módulo de simulación.

Ejemplo: módulo simplificado de intercambio de calor

En la Figura 2 se esquematiza un módulo particular de intercambio de calor. Los parámetros de operación serán U (coeficiente global de intercambio) y A (área total de transferencia). Las variables de entrada serán los datos de los fluidos que ingresan por carcaza y tubos respectivamente (caudales, temperaturas, presiones, entalpías, composiciones de todos los componentes y/o estado de agregación), ya que suponemos una filosofía modular secuencial, que impone como vimos la especificación de las corrientes de entrada al módulo. Especificadas las variables anteriores, debería procederse a un análisis de los grados de libertad del sistema y a la determinación de una especificación de las restantes variables a los efectos de obtener una secuencia acíclica. Aquí se plantearán los balances correspondientes

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

adoptando una especificación dada (el factor UA) para obtener un sistema compatible, sin entrar en el análisis de todas las variantes posibles de considerar.

Por otra parte, los programas de estimación de propiedades fisicoquímicas deben contemplar el cálculo de la capacidad calorífica de ambos fluidos (C_p) por algún método adecuado de estimación en función de los componentes a tratar (Capítulos VII y VIII).

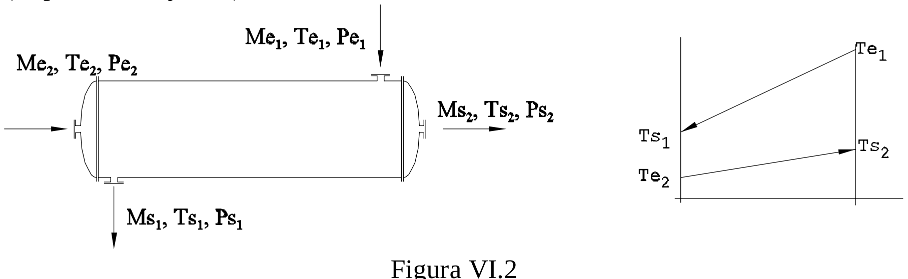


Figura VI.2

Como sabemos, para la confección del modelo se requiere plantear las relaciones básicas que gobiernan los fenómenos de transferencia. Esto es, los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, al igual que las relaciones funcionales del equipo.

Es conveniente comentar en este punto algunos aspectos importantes a tener en cuenta al desarrollar el modelo matemático representativo de un módulo de simulación de un equipo en particular. Dado que según conocemos, existen diversos niveles de rigurosidad con los cuales puede ser encarado el modelado, debe mantenerse coherencia entre el grado de detalle o rigurosidad deseado y las hipótesis a adoptarse al plantear los distintos balances o relaciones funcionales del equipo. Es importante mencionar además que los modelos rigurosos implican un consumo de horas/hombre para su desarrollo y tiempo de computación mucho más elevado que los modelos simplificados. Este factor (el esfuerzo que el usuario esté dispuesto a invertir en la simulación), ha de tenerse en cuenta en la selección de los modelos para una tarea de simulación.

Un conjunto de hipótesis que define un módulo de simulación simplificado para el equipo bajo análisis es el siguiente:

- Se contempla únicamente transferencia de energía entre dos fluidos sin cambio de fases.
- Se supone que el valor (U A) es suficiente como para alcanzar las temperaturas de salida especificadas.
- Se considera U constante. Además no se calcula su valor ya que se lo supone un dato conocido.
- Se asumen conocidas Me_1, Me_2, (U A), Te_1, Te_2 . El programa de cálculo fisicoquímico auxiliar proveerá los datos de C_{p1} y C_{p2} en función de las

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

composiciones, temperatura y presión.
- La diferencia promedio de temperaturas se calcula como un promedio aritmético.
- No se considera caída de presión en ambos fluidos.
- No se considera la influencia de la geometría en el intercambio.
- Sistema adiabático.

Debe notarse que si se introducen las dependencias para el cálculo de los coeficientes peliculares aparecen nuevas funcionalidades, por lo que en este caso lo más apropiado sería como mencionamos más arriba, aplicar un método adecuado para la asignación de variables a los efectos de lograr secuencias acíclicas o de mínimo esfuerzo de cómputo.

Balance de materia

Se ha supuesto que los flujos másicos de ingreso a tubos y carcaza son iguales a sus respectivas salidas (no existe acumulación). En forma de ecuaciones se traduce como:

$$Me_1 = Ms_1 \quad (20)$$

$$Me_2 = Ms_2 \quad (21)$$

donde Me_i: caudal másico de entrada; Ms_i: caudal másico de salida.

Balance de energía

Se ha asumido que todo el flujo de calor que pierde el fluido del lado carcaza (tubos) se transfiere al fluido del lado de tubos (carcaza). Esta suposición requiere adoptar hipótesis tales como considerar despreciables mecanismos de aporte de calor por radiación, considerar nulas las pérdidas a través de las paredes (equipo aislado totalmente) etc. En términos de ecuaciones lo expresado tiene la forma:

$$Me_1\ Cp_1\ (Te_1 - Ts_1) = Me_2\ Cp_2\ (Ts_2 - Te_2) = Q \quad (22)$$

Balance de cantidad de movimiento

Este balance tiene en cuenta fundamentalmente la pérdida de presión de los fluidos por razonamiento, efectos viscosos, etc. En este ejemplo simplificado se ha

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

supuesto que la presión de descarga es igual a la de entrada para ambos fluidos:

$$Pe_1 = Ps_1 \qquad (23)$$

$$Pe_2 = Ps_2 \qquad (24)$$

Relaciones fisicoquímicas

Dado que existen numerosas variantes para el cálculo de las variables fisicoquímicas de interés, según se detalla en los capítulos VII y VIII, se supone que el usuario ha seleccionado la metodología apropiada. Consecuentemente, las ecuaciones a utilizar y los parámetros correspondientes se suponen dados para enfrentar la tarea del modelado. En este sentido se supone a los programas fisicoquímicos como auxiliares del programa/modelo del equipo.

Debido a las simplificaciones introducidas, solamente será necesario el cálculo de la capacidad calorífica de los fluidos, que en forma funcional se puede expresar como:

$$C_p = C_p\ (T,\ P,\ X_i....X_{NC}\ ) \qquad (25)$$

$X_{i = 1 ... NC}$ composición de cada componente (i) en la mezcla de NC componentes.

Relaciones funcionales del Equipo

Este tipo de ecuaciones son características de cada operación unitaria involucrada y las simplificaciones introducidas en el modelado. En nuestro caso la ecuación de transferencia de energía simplificada es:

$$Q = U\ A\ [((Te_1 - Ts_2) + (Ts_1 - Te_2))\ /\ 2] \qquad (26)$$

Pueden existir además, dentro de las relaciones funcionales, ecuaciones de cálculo de parámetros característicos. En el ejemplo se ha supuesto que el usuario provee el valor del coeficiente de intercambio térmico U; pero en otro nivel de rigurosidad éste puede ser calculado a través de las relaciones funcionales comunes de la bibliografía (Kern y otros -ver bibliografía recomendada al final del capítulo-). Sin embargo, esta situación como ya comentamos complica el análisis del ejemplo e implica un mayor esfuerzo de cálculo, al igual que si se requieren cálculos de pérdida de carga.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En función de las ecuaciones anteriores, puede fácilmente demostrarse que las mismas conforman un sistema cíclico, ya que deberá iterarse para lograr la solución del sistema, esto es, deben calcularse, adoptando un procedimiento iterativo, los valores de las variables desconocidas, (Ts_1, Ts_2 , Q). Por ejemplo, si se supone un valor inicial para Ts_1, mediante la ecuación (22) se calcula Q. A partir de este valor y la ecuación (22) se calcula Ts_2. Se utiliza la ecuación (26) a los efectos de chequear el valor obtenido de Ts_1, para verificar si se satisface el error permitido al compararlo con el valor supuesto. Si el error es mayor al tolerado, se propone mediante algún método de convergencia una nueva estimación de Ts_1, y se itera hasta satisfacer dicho criterio (ver métodos iterativos, Capítulo III, y rasgado y particionado de sistemas de ecuaciones, Capítulo IV).

Se puede notar que la cantidad de módulos posibles de definir es un conjunto muy grande debido a la combinación de simplificaciones que pueden adoptarse, de acuerdo a los parámetros seleccionados, etc. En la mayoría de los simuladores convencionales existe una gran cantidad de módulos que por su utilización en la mayoría de los procesos químicos, constituyen un conjunto mínimo. Además, se contempla la opción para la incorporación de módulos propios del usuario para cubrir la falta de equipos particulares que no estén contemplados en la librería del simulador.

Modos de Cálculo - Niveles en el modelado de equipos

En la sección anterior se ha detallado el procedimiento de cálculo para un módulo de un intercambiador de carcaza y tubo con algunas hipótesis simplificatorias. En este caso el tipo de módulo se puede definir como un intercambiador de calor sin cambio de fase ya que en las ecuaciones planteadas (y simplificadas) no se contempla el cambio de fase en ninguna corriente. Una variante sería el abarcar condensadores o hervidores parciales, por ejemplo.

Para analizar distintos tipos de niveles de cálculo, supongamos en este caso el estudio de una instalación que ya está definida constructivamente y se pretende utilizar un simulador para el estudio de la performance del equipo de intercambio calórico. En este ejemplo, como se trata de una instalación conocida, están perfectamente determinados no solamente el área de transferencia sino las características geométricas del equipo. Se conocerán el número de tubos, material, cantidad de pasos, diámetros de tubos y carcaza, cantidad de bafles, etc.

Estos datos son innecesarios si utilizamos como módulo de simulación el desarrollado en la sección anterior. Pero con ellos se puede modelar el equipo de forma mucho más rigurosa determinando los coeficientes globales de transferencia; pérdidas de carga, etc., a través de las características de los fluidos y sus regímenes de flujo. Obviamente, las ecuaciones a utilizar serán más complejas que las descritas, (ver Kern, 1950) o (Bell Delaware, 1963). En definitiva, los distintos niveles de cálculo o versiones de equipos según sea la topología considerada, definirán

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

diferentes módulos de simulación para un mismo equipo (en este caso intercambiador de calor), por lo cual el usuario deberá optar entre ellos según sea el objetivo de su simulación.

VI.3 BREVE DESCRIPCIÓN DE LOS DISTINTOS MÓDULOS DE EQUIPOS PRESENTES EN UN SIMULADOR MODULAR DE PROCESOS QUÍMICOS.

En esta sección se describirán algunos de los equipos estándares que poseen la mayoría de los sistemas de simulación comerciales y/o académicos.

En general, las distintas operaciones unitarias de transferencia de calor, materia y cantidad de movimiento, definirán diversos módulos de equipos: bombas, compresores, torres, equipos de separación flash, turbinas, reactores etc.

A continuación se mencionarán brevemente los distintos módulos y sus características principales. Esta enumeración sólo debe considerarse indicativa, ya que no representa un listado completo de las opciones posibles; además, como mencionamos en secciones anteriores, éstas abarcan un número muy grande. Por otra parte, los manuales de los simuladores comerciales disponen de una descripción de los módulos que poseen, y una explicación del método de resolución adoptado para los mismos.

Equipos Divisores de Corrientes.

Constituye el equipo de mayor facilidad de resolución ya que no existen relaciones de equilibrio ni transferencia. Simula la división de una cañería (ducto) en varias y la variable de diseño será la relación de caudales de corrientes de salida a corriente de entrada.

En general, las composiciones, temperaturas, etc, de las corrientes de salida son iguales a las de entrada. Si se considera caída de presión, el modelo deberá contemplar la verificación de ciertos parámetros de salida (por ejemplo la fase), para lo cual el cálculo resulta más complejo.

Equipos Sumadores o Mezcladores

Estos son muy comunes dentro de cualquier simulador de procesos y constituye uno de los módulos elementales. Representan la operación de conexión de cañerías cuyos fluidos pueden tener distintas composiciones, temperaturas y estados de agregación por lo cual debe contemplarse para su modelado las ecuaciones representativas del equilibrio entre fases, además del balance de materiales. También debe contemplarse si existe la posibilidad de reacciones químicas, etc.

Nuevamente, si se considera la caída de presión, el cálculo se complica, involucrando relaciones similares a las que se utilizan para resolver un módulo de evaporación flash.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Equipos de Intercambio Calórico

Como se ha mencionado anteriormente, un típico módulo es el que representa a los intercambiadores de calor con dos entradas y dos salidas que simula la operación convencional de un equipo de intercambio. Un conjunto de parámetros característicos está representado por el parámetro (UA) como se ha detallado anteriormente.

Además, las ecuaciones de balance, las relaciones funcionales y las relaciones fisicoquímicas pueden contemplar cambios totales (o parciales) de fases en alguna o ambas corrientes. De esta manera se contemplan operaciones tales como hervidores o condensadores totales o parciales, etc.

Intercambiadores rigurosos con geometría dada.

Este nivel de equipo estima el comportamiento de los fluidos con mayor rigurosidad que los anteriores y consecuentemente sus ecuaciones de balance y relaciones funcionales serán mucho más complejas.

Los modelos rigurosos de los intercambiadores de calor incluyen la determinación del coeficiente global de transferencia (U) calculando las resistencias a la transferencia debido a los coeficientes peliculares, materiales de los tubos, y la distribución y régimen de flujo de los fluidos circulantes. Además se tiene en cuenta la configuración y geometría del equipo en el cálculo del factor de configuración F_T.

También puede incluirse el cálculo de la pérdida de carga en la carcaza y los tubos respectivamente.

Equipo de Contacto Directo entre fases

Estos equipos son de mayor importancia en un sistema de simulación. Involucran todas las operaciones de separación por contacto directo como ser líquido-líquido (extracción), gas-líquido (destilación, absorción, strippers, etc.).

Dentro de los niveles posibles de cálculo de equipos con etapa de transferencia entre fases existen gran variedad de métodos que poseen mayor o menor rigurosidad en el cálculo de los mismos.

A manera de ejemplo puede citarse -entre los denominados "short-cut" o métodos simplificados (globales) para operaciones de destilación- al de (Fenske, 1932) para la determinación (especificada la separación o tarea) del número mínimo de etapas; al de (Underwood, 1948), para la determinación de mínimo reflujo, entre otros. Los parámetros necesarios a ser especificados para el cálculo serán sencillos (por ej.: número de bandejas teóricas). La combinación de los métodos de Fenske, Anderwood y Winn permiten representar una instalación de separación completa. En general será necesario especificar la separación de los componentes clave liviano y pesado, el tipo de condensador (total o parcial) y hervidor de fondo. Como resultados se obtendrán la condiciones de las corrientes de salida, reflujos internos y la ubicación óptima de la bandeja de alimentación.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Estos métodos simplificados son de gran utilidad para la *resolución aproximada* de sistemas ideales o casi ideales (ej. ciertas mezclas de hidrocarburos). Su utilización no se recomienda en mezclas no ideales, o en configuraciones con un número significativo de entradas/salidas, en las cuales los errores de cálculo resultan significativos. Salvo para aproximaciones muy groseras, o limitaciones en tiempo de cómputo no superables, estos métodos deben utilizarse para inicializar otros más rigurosos, o para evaluar cotas en una estrategia de búsqueda del óptimo, según vimos en la sección II.3.2

Para operaciones de absorción, stripping y desorción se puede citar el método simplificado de Edmister. Este método se basa en la definición de los factores efectivos de absorción y stripping. Su teoría es correcta para dos etapas de equilibrio, y aproximada para un número mayor. El campo de aplicación (componentes en la mezcla) es similar al del método de Fenske. Su ventaja radica en que no existe necesidad de definir la separación entre los componentes claves, y por lo tanto su estrategia de resolución utiliza como variables de diseño el número de platos, el reflujo interno y la ubicación de la alimentación; lo cual aproxima su funcionamiento al modo tradicional de simulación secuencial.

Métodos más complejos pueden involucrar cálculos plato a plato o matriciales, tales como los propuestos por Tomich o Naphtali-Sandholm (1971) que producen como resultado no sólo el conjunto de corrientes de salida sino además los perfiles internos de la columna (ver Capítulo X). El primer método es semiriguroso, y resulta de gran utilidad para la resolución de sistemas multicomponentes cuyo comportamiento sea del tipo ideal o levemente no ideal. Permite la definición de cualquier número de alimentaciones y/o extracciones y el tipo de condensador y/o hervidor. El fundamento de su estrategia de resolución se baja en la obtención de correcciones simultáneas de caudales y temperaturas en cada plato a través del cálculo y regeneración de un jacobiano que contempla la incidencia de los errores en los balances de materia y energía simultáneamente. El método no incluye correcciones en los balances por desviaciones del comportamiento ideal y por lo tanto puede no converger en sistemas altamente no ideales.

Entre los métodos rigurosos que permiten resolver sistemas multicomponentes altamente no ideales pueden mencionarse, entre otros, los propuestos por Boston y Sullivan (1974) y el propuesto por Naphtali-Sandholm (1971). Alguno de estos métodos serán descriptos en detalle en el capítulo X, correspondiente al modelado de equipos de separación de mezclas multicomponentes múltiple etapas en contracorriente; como un ejemplo del tratamiento matemático complejo que debe adoptarse al pretender modelar “rigurosamente” estos procesos de separación.

En general, los métodos incorporados a los simuladores se basan en propuestas académicas que han sido modificadas en varios aspectos cuyos detalles en general se destacan en los manuales correspondientes o bien en la bibliografía

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

específica.

Reactores

Estos equipos, muy comunes en instalaciones de plantas químicas, son los más dificultosos de resolver en forma rigurosa.

El principal inconveniente radica en que las reacciones químicas poseen cinéticas y estequiometría específicas y muy diversas de acuerdo al sistema a simular, resultando por lo tanto imposible la generación de modelos que contemplen todas las posibilidades.

El modelo más simplificado (y común en todos los simuladores) es el de "caja negra", en el cual definiendo la estequiometría de la reacción, seleccionando un componente clave y especificando la conversión final y la temperatura del producto, se obtendrán las condiciones completas de la corriente de salida.

Otro modelo más específico será la simulación de reactores tanques agitados (o flujo pistón) pudiendo seleccionarse cinéticas convencionales de primer o segundo orden, por ejemplo.

Debe remarcarse que para el cálculo de sistemas reaccionantes en equilibrio no solamente habrá de contemplarse ecuaciones de balance; relaciones funcionales y relaciones fisicoquímicas, sino que habrá de incorporarse además, parámetros de la reacción como ser las relaciones estequiométricas específicas para cada caso. En general, los módulos de reacción, debido a su especificidad, serán provistos por el usuario, que incorporará sus propios datos del sistema reaccionante y/o ecuaciones particulares que representen correctamente el sistema a simular; si se pretenden resultados muy ajustados al comportamiento real en las diversas condiciones de operación de la planta.

En el Capítulo XVIII se desarrolla un ejemplo específico para la simulación dinámica de un biodigestor para el tratamiento de efluentes líquidos, detallándose las distintas hipótesis adoptadas y el sistema de ecuaciones resultante para el modelo.

Equipos de separación flash

Los equipos de separación flash simulan la evaporación súbita de una (o varias corrientes). El caso típico es el flujo a través de una restricción, cuya caída de presión en forma adiabática provoca una vaporización parcial, debido a lo cual en un tanque posterior puede lograrse la separación en las fases líquido y vapor respectivamente. Una situación más compleja puede contemplar dos fases líquidas y una vapor.

Estos equipos resultan muy importantes desde el punto de vista práctico y conceptual. En efecto, todo simulador debe calcular en cada etapa de simulación el estado de agregación de las corrientes (por ejemplo a la salida de un nodo sumador de varias corrientes), a partir de su composición global y su contenido energético y la presión del sistema. Todos estos cálculos tienen íntima relación con la metodología

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de resolución de las ecuaciones de un flash.

Por otra parte, conceptualmente, este módulo resulta básico para la comprensión de los modelos de separación más complicados. Por ejemplo, un sistema de separación múltiple etapa multicomponente en contracorriente puede asimilarse de hecho a una sucesión de equipos flash conectados entre sí de acuerdo a cierta topología. Procediendo de esta manera, una columna de destilación por ejemplo, podría resolverse secuencialmente, etapa a etapa. Esta es precisamente la metodología utilizada por los métodos etapa a etapa propuestos para la simulación de tales sistemas, aunque no resulta efectiva para problemas que involucran mezclas no ideales o un gran número de etapas y/o alimentaciones, debido a problemas de convergencia.

También las operaciones de intercambio calórico para sistemas con cambio de fases en mezclas multicomponentes están vinculadas con el cálculo de equipos flash.

En general, existen numerosas variantes para la simulación de estos equipos. Esto es común a otros módulos de simulación, ya que son numerosas las variables que pueden ser fijadas en función de los grados de libertad del sistema. En el Capítulo IX se analizará en detalle este punto.

Bombas y Válvulas

El módulo simplificado de ambos equipos es similar. En una bomba, la variable de diseño será la presión de descarga, lo mismo que en la válvula, no contemplándose los cambios entálpicos de las corrientes por motivo de la variación de presión. Para ambos casos, versiones más rigurosas implican cálculos más complicados.

Por ejemplo, para bombas existen modelos que adicionan el trabajo desarrollado a la entalpía de la corriente de salida y el cálculo posterior de una subrutina o subprograma correspondiente al módulo de un flash proveerá la temperatura y fase en la descarga. Otros modelos más rigurosos contemplarán el tipo de bomba a utilizar (rotativas, alternativas, etc) y necesitarán la provisión de las curvas características de funcionamiento para calcular las variables de las corrientes de salida. El mismo cuadro puede presentarse para las válvulas, por ejemplo incorporando características propias del tipo y condición del fluido y el flujo, etc.

Compresores y Expansores

Estos equipos en la generalidad de los casos representan evoluciones de compresión y expansión politrópica. En las versiones simplificadas se requerirá como variable especificada la presión de descarga, con la cual mediante algoritmos iterativos se logra el cálculo de las propiedades de las corrientes de salida y el trabajo necesario a proveer (compresores) o entregado (expansores).

De la misma forma que en el apartado anterior, versiones más rigurosas

requerirán especificación del tipo de equipo a utilizar (centrífugo, alternativo, etc) y las curvas características provistas por los fabricantes de los mismos, que pueden ser incorporadas mediante facilidades propias que brindan los distintos simuladores comerciales.

Otros Equipos

En el listado anterior, si bien se han mencionado los equipos más comunes, no se han agotado todos los módulos que pueden existir en un simulador comercial. Entre ellos se puede citar hornos de procesos, equipos de separación sólido-líquido, o sólido-gas, transporte de sólidos, ciclones, electrolitos, etc.

Sin embargo, dada la cantidad de posibilidades y alternativas potenciales de ser simuladas al contemplar la gama de procesos químicos en general, es fácilmente comprensible que es imposible disponer de una biblioteca general de módulos que los contemple a todos. Es por ello que todo simulador de procesos modular debe contemplar la posibilidad que el usuario incorpore sus propios módulos. Lo que obliga a su vez a saber cómo desarrollarlos.

Existe abundante bibliografía a la cual se puede recurrir para una descripción detallada de las ecuaciones y métodos de cálculo y convergencia de los principales métodos numéricos e hipótesis asumidas al construir los módulos más generales, propios de un simulador convencional. Obviamente, la referencia obligada resulta el manual del simulador a utilizar, en el cual generalmente se explicitan (aunque a veces muy someramente) las hipótesis asumidas y el método numérico empleado en la solución, citando además, bibliografía complementaria, que resulta conveniente el usuario analice con atención. Se remarca nuevamente la importancia de conocer todos los detalles acerca del modelo utilizado, a los efectos de poder interpretar correctamente los resultados en cada situación a simular.

Equipos Especiales o Controladores

La interpretación tradicional de la herramienta de simulación (modular secuencial) es la reproducción del funcionamiento de un equipo seleccionando como variable de diseño los parámetros característicos de su funcionamiento; tomando como datos los valores de las corrientes de entrada y obteniendo como resultado las variables de las corrientes de salida.

Sin embargo, a veces nos interesa fijar algunas variables en valores conocidos durante la simulación. En ciertos simuladores (en particular los que siguen la filosofía modular secuencial pura) existen equipos "controladores" cuya operación será necesaria para mantener a ciertas variables elegidas en los valores deseados. En modo simulación esta “operación de control” puede ser reproducida en función de los siguientes procedimientos:

- Módulos de equipos controlados a través de una/s especificación/es

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de salida fija.
- Módulos especiales o controladores "Feed-back".
- Módulos especiales o controladores "Feed-forward".

No debe confundirse esta estrategia de simulación con una operación de control real de la planta a simularse. El control de un proceso (ya sea real o en simulación) sólo tiene sentido cuando existan variables evolucionando en el tiempo (ver Capítulos XIV al XVIII).

El uso de estas opciones está generalmente explicitada en los manuales de cada simulador.

Módulos de equipos con especificación de salida fija

En este caso se consigue el efecto de mantener una variable en el valor deseado utilizando módulos de equipos programados para tal fin. Esto se logra habiendo desarrollado el modelo incorporando precisamente la información de la variable especificada (que se desea fijar en un valor) como una ecuación más; que define precisamente esa asignación. Por ejemplo, un nodo divisor puede ser programado de tal forma que asigne a una de sus salidas un valor de caudal (o composición para uno de los componentes de la mezcla) en un valor dado. Para ello deberá obviamente calcularse (en función de los grados de libertad), la relación de partición entre corrientes (variable resultado del equipo en este caso) para cumplir con la especificación deseada. En este divisor la variable especificada será el caudal de una de las corrientes de salida, y el resultado de la operación del mismo será el coeficiente de partición definido como el cociente: caudal de la corriente de salida/ caudal de la corriente de entrada. Estos módulos deben ser utilizados cuidadosamente para evitar configuraciones en las cuales se violen los grados de libertad totales del sistema (diagrama de flujo de la planta completa), o bien cuando se especifican valores incoherentes.

Debe remarcarse que los equipos “controlados” a través de este procedimiento pueden generalizarse a través de la programación de módulos que operan en forma inversa a la definición convencional en simulación secuencial pura, que supone conocidas las entradas y se calculan todas las salidas. En otras palabras, se diseñan módulos en los cuales en lugar de seleccionar como un conjunto de entrada las “corrientes físicas convencionales” de ingreso al mismo, se proveen como datos valores de algunas variables (corrientes) de salida; reorientando los módulos y el sentido de información de las corrientes asociadas a ellos, respetando lógicamente los grados de libertad del sistema. Esto es, se flexibiliza el orden secuencial de tal manera de poder especificar valores a cualquier variable o parámetro de equipo, según los datos que se dispongan.

Esta forma de operar está incorporada en algunos de los simuladores comerciales, brindando al usuario una mayor flexibilidad, según discutimos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

anteriormente, bajo otro enfoque.

Módulos controladores "feedback"

Los algoritmos de controladores feedback (o por retroalimentación) en un simulador estacionario modular secuencial son “equipos” cuyo objetivo es operar sobre un parámetro o variable de la corriente denominada manipulada en función de otro parámetro o variable de la corriente llamada variable controlada. En realidad no se trata de un módulo que representa un equipo de planta equivalente a una operación unitaria sino que impone en la operación de simulación un “control” para forzar la convergencia hacia el valor especificado. Debe remarcarse en este caso que la analogía lingüística no debe llevarnos a confusión respecto del uso de un módulo de este tipo en simulación estacionaria, y el funcionamiento de un controlador en un proceso real.

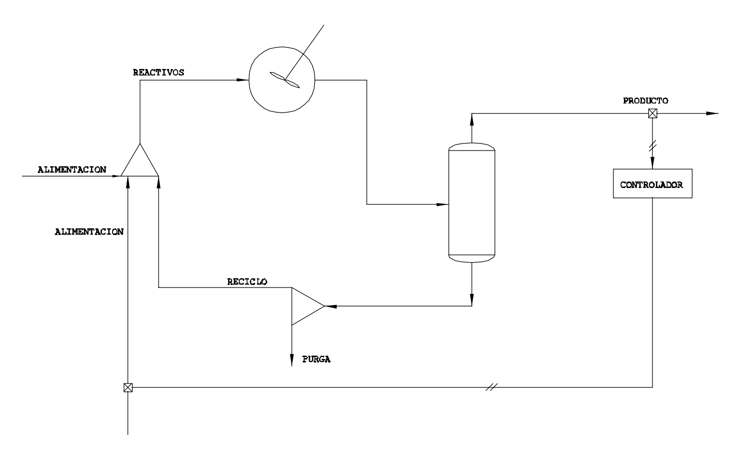


Figura VI.3: Esquema de un módulo controlador. Se "controla" la composición de un componente en el producto manipulando el caudal de una de las corrientes que ingresa al reactor.

Un ejemplo puede observarse en la Figura VI.3. El sistema está compuesto por un mezclador (sumador), un reactor y un tanque flash y se desea controlar la concentración de un producto en la corriente de salida del flash a través de la cantidad de uno de los reactivos que ingresan al sistema.

La lógica del módulo controlador es la siguiente:

- Se resuelve el mezclador; reactor y posteriormente el equipo flash, hasta lograr convergencia en el ciclo correspondiente.
- Luego el controlador compara el valor de la variable controlada con su consigna y modifica la variable manipulada para reiniciar el cálculo hasta

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

alcanzar la convergencia, según la especificación dada.

Obviamente, el sistema o lógica central del simulador deberá coordinar estos cálculos introduciéndolos en la secuencia general de resolución de la planta completa. Debe remarcarse que por esta vía se introducen nuevos ciclos de iteración a los mencionados en la sección IV.3.1.

Módulos Controladores Feed-forward

Estos equipos se utilizan para fijar un parámetro de operación aguas abajo en la secuencia de resolución de acuerdo con el valor que tomó una variable seleccionada. Su modo de operación es similar al módulo "controlador" feed-back, desde el punto de vista conceptual.

VI.4 ASPECTOS BÁSICOS A TENER EN CUENTA EN EL USO DE UN SIMULADOR DE PROCESOS MODULAR SECUENCIAL EN ESTADO ESTACIONARIO.

En esta sección se pretende someramente destacar algunos aspectos que necesariamente deben considerarse para el efectivo uso de los programas de simulación. En efecto, un simulador comercial es una herramienta muy importante que permite, bien utilizada, grandes ventajas; logrando resultados muy efectivos con relativamente poco esfuerzo. Sin embargo, dependerá en gran medida del grado de conocimiento del usuario, el utilizar efectivamente la gran cantidad de información y oportunidades que brinda la herramienta. Más aún, interpretaciones equivocadas implicarán un serio riesgo, y diseños o conclusiones totalmente inadecuados.

Si por ejemplo se supone el problema de simular una planta nueva, que involucra mezclas con sustancias para las cuales se cuenta relativamente con muy pocos datos fisicoquímicos (falta de datos experimentales y/o datos en la bibliografía) es evidente que las propiedades serán estimadas a través de correlaciones generalizadas cuyo margen de error puede ser considerable y por lo tanto la incertidumbre en los cálculos es difícil de estimar. Resulta evidente que, independientemente de utilizar modelos muy rigurosos para la simulación (pese al esfuerzo y tiempo computacional involucrado) los resultados serán igualmente poco confiables debido a la utilización de datos fisicoquímicos dudosos con un grado de precisión imposible de cuantificar.

Consecuentemente, la premisa de utilización de métodos de cálculo rigurosos trae aparejada la necesidad de acoplarlos a sistemas fisicoquímicos confiables y de errores de cálculo relativamente bajos. De lo contrario la exactitud ganada por el algoritmo se pierde en la estimación de las propiedades.

Otro punto a tener en cuenta es la etapa del proyecto en la cual se utilice el simulador. Por ejemplo, durante la etapa de síntesis y análisis del diagrama de flujo de información, donde se necesita evaluar distintas alternativas de funcionamiento

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de una instalación para seleccionar la opción óptima, generalmente las precisiones son pocas y los datos disponibles escasos. Además, será necesario realizar una gran cantidad de simulaciones para comparar alternativas diversas. Consecuentemente, los modelos simplificados o semirigurosos son los más indicados, ya que involucran un bajo tiempo de cálculo y permiten una comparación medianamente confiable como un criterio preliminar de selección de alternativas. Aquí estamos preocupados en valores relativos (comparaciones) y no en valores absolutos (diseño definitivo).

Una vez seleccionado el proceso, la etapa siguiente exige la resolución del balance de materia y energía, para ser utilizados en el posterior diseño de los equipos y su costeo, etc. Por lo tanto, en esta etapa será necesario adoptar opciones de cálculo lo más rigurosas posibles, y proveerse de los datos necesarios para su ejecución. Es decir, que en general durante la tarea del diseño se utilizarán progresivamente variantes más complejas, a medida que la disponibilidad de datos y la marcha del proyecto (por ejemplo factibilidad económica) lo exija, y no al revés.

Hasta aquí, sólo se han discutido aspectos que hacen a la conveniencia de utilizar versiones de cálculo de distinto grado de exactitud, y su relación con los algoritmos de estimación de propiedades fisicoquímicas seleccionados. No obstante, existen muchos otros aspectos a ser tenidos en cuenta. Entre ellos, se pueden mencionar:

Una adecuada selección de los módulos de equipos correspondientes al DFI.

Como sabemos, el DFI es el esquema que reemplaza a la planta real (como hemos visto por ejemplo en el proceso de desalación, Figura V.4). Esta situación puede presentarse muy a menudo por ejemplo un termosifón en una torre de destilación, la necesidad de contemplar parámetros particulares del condensador y/o hervidor en una torre de destilación, etc. En la Figura 4 se indica el esquema del DFI para el caso de una torre de destilación con un hervidor y condensador total del cual se desea conocer la performance, por lo que debe utilizarse una versión rigurosa de cálculo de intercambiadores de calor con cambio de fase, supuesto que no está incorporada obviamente en el (los) modelo(s) (módulo(s)) de torres de destilación disponibles en la biblioteca de módulos en el simulador.

En este caso, el módulo seleccionado para simular el intercambio de calor (condensador y hervidor) deberá corresponderse con las necesidades de la simulación. Obviamente, para la columna de destilación necesitamos adoptar un módulo del tipo absorbedor, con corrientes en el tope y fondo de entrada/salida según se indica en la Figura 4.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

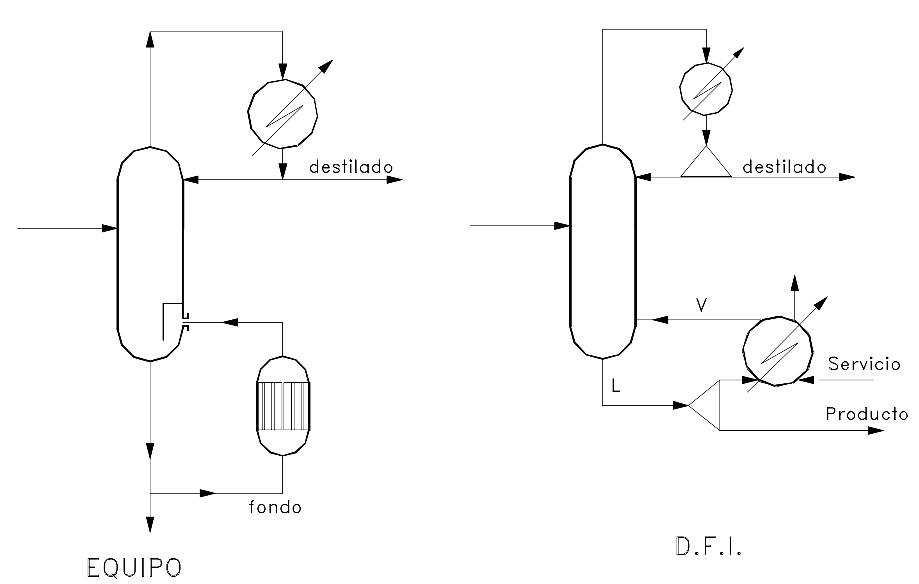


Figura VI.4: "DFI de una torre de destilación con hervidor y condensador específicos"

Una adecuada consideración de los parámetros de equipos.

En este punto debe tenerse en cuenta la coherencia y consistencia de los datos provistos y las opciones de cálculo seleccionadas. Por ejemplo, no es lo mismo el número de etapas teóricas que las reales y considerar o no la eficiencia de separación de las etapas en equipos de contacto. Más aún, deberá optarse por considerar la eficiencia constante, o bien calcularla por algún método de estimación, o tener acceso a datos reales de planta, o bien de la bibliografía; asumiendo un valor global o bien para cada componente y cada plato se asignará el valor correspondiente.

Otro punto es la especificación de variables en cada equipo, por ejemplo una pureza dada y un reflujo menor al mínimo para una columna de destilación. En general, las especificaciones deben realizarse teniendo en cuenta la coherencia con los objetivos del equipo/módulo en particular, pero también contemplando los grados de libertad de la planta en su globalidad.

Selección de los métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas

Este no es un tema menor. En efecto, la composición, temperatura y presión de la mezcla, al igual que la presencia de sólidos, electrolitos o bien la existencia de varias fases, son datos cruciales a considerar. Por ejemplo, existen métodos de estimación o algoritmos de cálculo de equipos que no consideran (por las hipótesis implícitas en su desarrollo) la presencia de reacciones químicas o bien la existencia de más de una fase. Más aún, no chequean, durante el cálculo, la potencial presencia

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de las mismas, para enviar un mensaje de advertencia al usuario. Esto puede, según el caso, conducir a resultados equivocados.

Además, ya se analizará con mas detalle en los Capítulos VII y VIII que para mezclas no ideales, o cuando existen ciertos componentes específicos en la mezcla, no todas las correlaciones son aplicables.

Uso de módulos controladores

Muy frecuentemente se incorporan al DFI (al simular en estado estacionario una planta dada), para "reproducir" algún controlador existente (o para fijar una variable), los "equipos controladores" disponibles en la biblioteca de módulos de la mayoría de los simuladores. Este "control perfecto" debe entenderse desde el punto de vista conceptual para no cometer errores, según ya discutimos anteriormente. Más aún, deben contemplarse los grados de libertad al especificar ciertas variables. Si bien los simuladores comerciales generalmente a nivel de módulos específicos chequean las sobre o sub-especificaciones, no necesariamente se lo hace con la planta completa.

Interpretación de los resultados

Debe tenerse sumo cuidado en la interpretación de los resultados según las versiones de cálculo utilizadas. Es claro que las versiones simplificadas están sujetas a grandes errores según el caso. Por ejemplo el uso de los algoritmos propuestos por Fenske, Gilliland y Anderwood en el caso de una torre de destilación azeotrópica. Sin embargo, las versiones rigurosas no significan "exactitud" absoluta. Además, debe considerarse que siempre subsisten un número importante de hipótesis. Por ejemplo, la presión en las columnas de destilación se asume generalmente constante. Esto es, no se considera la hidráulica, la geometría del plato y/o relleno, caídas de presión, etc. (ver capítulo X y XV).

La interpretación de los resultados también exige ubicación respecto a los objetivos. En efecto, los simuladores están orientados, principalmente, a resolver los balances de materia y energía, y con cierto alcance, los de cantidad de movimiento. Por lo tanto, los aspectos funcionales y geométricos, o de diseño, son por lo general escasamente considerados. Por ejemplo, la salida de un expansor y/o compresor estará caracterizada por una temperatura o un título pero nada se expresa respecto de los materiales utilizados, sus limitaciones, o bien la "lógica" o factibilidad de la operación en función del entorno, etc. En los cálculos de torres de destilación se puede variar su reflujo, obteniéndose resultados, pero debe además tenerse en cuenta el diámetro o el factor de capacidad para completar el análisis, ya que generalmente, en función de los niveles de rigurosidad disponibles en los simuladores comerciales, no entra en los cálculos.

En definitiva, existen numerosos aspectos a tener en cuenta en la tarea de simulación de procesos. Algunos, sólo mencionados aquí a modo de ilustración, serán ampliados convenientemente en los capítulos correspondientes. Muchos otros, la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

mayoría, sólo podrán ser contemplados por el usuario ante cada problema, utilizando su criterio ingenieril.

Finalmente, una última reflexión. El simulador una vez incorporados los datos, genera rápidamente resultados (en segundos, o por lo menos en un lapso que no supera horas de trabajo, según la complejidad del problema). En consecuencia, en poco tiempo de trabajo se generará una gran cantidad de información que deberá procesarse. Además, la información que se obtiene es crucial, ya que implica el basamento para el posterior diseño de los equipos, la selección de una alternativa para el proceso, etc. La responsabilidad de la interpretación de los datos es del ingeniero de procesos, no del simulador. Este no se equivoca, solo resuelve el sistema de ecuaciones correspondientes. Una vez dados los datos solo existen dos posibilidades, o converge o no. *El primero es el caso deseado, obviamente. Pero también el de más cuidado!. Ahora el responsable de los resultados, y de su correcta interpretación, es Ud.!*

BIBLIOGRAFIA CITADA

- Edmister, W. C., "Absorption and Stripping Factor Functions for Distillation Calculation by Manual Digital-Computer Methods", AIChE Journal, Vol. 3, Nº 2, p. 165.
- Evans L, V. Advances in Process Flowsheeting Systems", Foundations of Computer Aided Chemical Process Design, Vol. I, pág. 425.
- Fenske MR, "Fractionation of Straight", Run Pennsylvania , Gasoline. Ind. Eng. Chem., Vol. 24, p. 482 (1932).
- Kern, D., "Process Heat Transfer" Mc. Graw Hill Book Company, NY 1950.
- Naphtali, L., and D.P. Sandholm, "Multicomponent Separation Calculation by Linearization", .AIChE Journal, Vol. 17, Nº1, January 1971, p. 148.
- Tomich, J. F. "A New Simulation Method for Equilibrium Stage Process"., AIChE Journal, Vol. 16 Nº2, p. 229, March 1970.
- Underwood, "Fractional Distillation of Multicomponent Mixtures", Chem. Eng. Prog. , 44, p. 603 (1948).
- Winn F., W., "Latest Advances in Superfractionation",. Petroleum Refiner, Vol. 39, Nº 6, june 1960, p. 139.

BIBLIOGRAFIA RECOMENDADA

- Mathematical Modeling in Chemical Engineering, R.G.E. Franks, John Wiley and Sons Inc. NY - 1965.
- Modeling and Simulation in Chemical Engineering, RGE Franks - John Wiley and Sons Inc. NY 1972.
- "Fundamentals Principles of Heat Transfer", S. Whitaker, Pergamon Press,Inc. NY, 1977.
- Graph Theory in Modern Engineering, Henley, W., Academic Press, N.Y,

1973.
- Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomoI): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- Cerro R. L., Arri L. E., Chiovetta M. G. y Perez G., “Curso Latinoamericano de diseño de procesos por computadora”, Parte I (tomo II): Simulación de procesos por computadora”; Agosto de 1978, INTEC, Sta. Fe, Argentina.
- Westerberg A.W., Hutchison H. P., Motard R.L., and Winter P., “Process Flowsheeting”, Cambridge University Press, 1979.

CAPÍTULO VII

PROPIEDADES TERMODINÁMICAS DE EQUILIBRIO

Por
Jorge A. Rodríguez

VII.1. INTRODUCCIÓN

Según hemos comentado en el Capítulo VI, un pilar fundamental para el advenimiento de programas computacionales para la simulación de equipos en ingeniería química es, en paralelo a la informática y el cálculo numérico, el gran avance experimentado en el área de la fisicoquímica y la termodinámica teórica, que entre otras cosas contribuyeron dando a luz numerosos métodos para la estimación de las propiedades típicas que caracterizan a las sustancias con las cuales trabaja un ingeniero químico, como ser constantes de equilibrio, propiedades de transporte como conductividades térmicas, viscosidades, capacidades caloríficas, presiones de vapor, etc. La utilidad de estos métodos radica en su capacidad de estimar, a partir de una expresión funcional que contiene unos pocos parámetros que se determinan experimentalmente, la gran mayoría de las propiedades antes mencionadas, con un error aceptable, fácilmente implementables en computadora, y lo que es más importante, con la propiedad de generalización, ya que sólo basta con tener una buena base de datos con los parámetros correspondientes. Esta generalización no sólo significa que con la misma expresión podemos calcular las propiedades de todas las sustancias puras de interés (para las cuales la ecuación es aplicable, obviamente), sino que a partir de otros pocos parámetros pueden extenderse a mezclas multicomponentes, de las cuales, obviamente, no es necesario aclarar que existen un número muy grande, del orden de millones de potenciales mezclas de interés industrial para las cuales deben calcularse sus propiedades. De esta forma, dada una base de datos de parámetros y constantes tanto para sustancias puras como para describir los efectos de interacción entre pares de ellas, por ejemplo, podemos contar con un banco de modelos apto para la estimación de las propiedades de interés para las mezclas potenciales que deban analizarse. Es esto lo que hace atractivo a un simulador de procesos, ya que podemos pensar en una generalidad sin necesidad de recurrir a métodos particulares para cada sustancia o mezcla a tratar.

No obstante, no debe pensarse que un simulador puede resolverlo todo. Obviamente, aquí podremos comprender una de sus limitaciones. En efecto, sólo podremos tratar las sustancias para las cuales podemos estimar sus propiedades. De lo contrario debemos introducir al banco de modelos de estimación, ya sea nuestro

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

propio método (modelo de estimación) o bien las constantes particulares de la mezcla a analizar, para un dado modelo existente en el simulador.

El objetivo es justamente analizar estos problemas, introduciendo al alumno al campo de la estimación de las propiedades características de las sustancias puras y las mezclas. Sin embargo, debe comentarse que solo tenemos espacio para una breve introducción. Existe numerosa bibliografía al respecto, la cual se lista al final de éste y el próximo capítulo para que el lector con deseos de profundizar en el tema (lo cual es fuertemente recomendable) pueda hacerlo sin dificultades.

En este capítulo trataremos los métodos de estimación de las propiedades termodinámicas de equilibrio necesarias para la construcción de modelos matemáticos que permitan simular los procesos más comunes de la industria química. Pondremos especial énfasis en las propiedades relacionadas con los procesos de separación, apuntando a los modelos de simulación estática y dinámica. Limitamos el campo de estudio a los casos más habituales; no trataremos los polímeros ni los electrólitos. Tampoco consideraremos el efecto de los incondensables sobre el equilibrio líquido-vapor. No trataremos el equilibrio sólido-líquido ni sólido-vapor.

Para poder concretar cualquier proyecto de ingeniería es imprescindible conocer las propiedades de los materiales involucrados en el mismo. Así como no se puede pensar en construir un edificio si se desconocen las propiedades del acero y del hormigón, un médico no puede trabajar desconociendo anatomía o un agrónomo desconociendo las propiedades del suelo. Para el Ingeniero Químico es imprescindible conocer las propiedades de las sustancias con las que trabaja.

Las propiedades termodinámicas de cualquier sustancia dependen de la naturaleza de las moléculas de la misma. Por lo tanto la generalización de las propiedades de los fluidos en un cuerpo teórico que permita explicarlas totalmente requiere una comprensión total del comportamiento de las moléculas. Por desgracia, esta comprensión todavía no está a nuestro alcance. Las herramientas teóricas que están disponibles para la estimación de propiedades son de tipo racional (basadas en leyes termodinámicas y en la teoría cinética del comportamiento de las moléculas) y de tipo empírico (basadas en la correlación de datos experimentales por medios matemáticos), o de tipo mixto, es decir que combinan ambas clases. Las correlaciones completamente empíricas son a menudo muy útiles, pero se debe tratar de evitar su empleo fuera del rango de variables empleado para su deducción. En general, cuanto más sólida sea la base teórica de una correlación, más confiable resulta, particularmente cuando ha sido extensamente probada comparando sus resultados con la realidad. No obstante, en los casos en que la base teórica no es sólida, siempre que sea posible es preferible basarse en datos experimentales, cuidando de no extender la aplicación de la técnica más allá del campo para el cual es válida.

Existen compilaciones muy completas de datos que tabulan propiedades experimentales en muchos manuales y revistas especializadas que publican periódicamente nuevos datos experimentales así como métodos de estimación de propiedades termodinámicas. Muchos paquetes de simulación en computadora

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

incorporan rutinas de predicción de propiedades termodinámicas, y cada uno puede construir sus propios programas para este fin, implementando algunas de las técnicas que trataremos en este capítulo.

En general se habla de estimación de propiedades ya que cualquier método es sólo aproximado, brindando a lo sumo un valor estimativo del real. Un problema importante es justamente conocer como estimar el error promedio con el cual estamos trabajando al aplicar uno de los métodos disponibles para una mezcla y propiedad a estimar. Es importante destacar que existen casos de diseño crítico donde pequeños errores en la propiedades fisicoquímicas son catastróficos. Por ejemplo, es conocido que cuando se requieren purezas extremas, el número de platos teóricos, para pequeños incrementos en la pureza, cambia radicalmente, siendo muy sensitivo a la volatilidad relativa de los componentes a separar. Por lo tanto, un error pequeño en la estimación de los mismos puede tener mucha importancia en el resultado final.

En muchos casos prácticos no se necesita demasiada exactitud. Para estos casos, el mejor método no es necesariamente el más exacto. Por varios motivos de índole práctica (por ejemplo la necesidad de realizar gran cantidad de cálculos) puede ser preferible usar un método que requiera menor cantidad de datos que otro de mayor exactitud. Para poder elegir el tipo de método más apropiado en cada aplicación el ingeniero deberá conocerlos en detalle y estar familiarizado con su uso, grado de exactitud y rango de validez.

VII. 1.1 Sistemas Termodinámicos

Los sistemas termodinámicos son generalmente clasificados en ideales, aproximadamente ideales o semi-ideales y no ideales. Los sistemas semi-ideales son aquellos en los que pueden tener éxito los modelos ideales (que pertenecen a sistemas teóricos que no existen en la realidad), tales como la ley de gases ideales, la ley de Henry, la ley de Dalton y otras por el estilo. En estos modelos simples no se toman en cuenta las interacciones entre partículas.

Los sistemas no ideales se apartan fuertemente en su comportamiento del que describen los modelos ideales simples y solo se pueden describir mediante métodos de estimación de propiedades termodinámicas que toman en cuenta las interacciones entre partículas, como ser los efectos asociativos, el momento dipolar y otros que limitan la libertad de acción de las moléculas o condicionan en determinadas direcciones dicha libertad. Muchos sistemas no ideales se comportan de tal modo como consecuencia de su estructura química. La presencia de grupos fuertemente polares en sus moléculas, el gran tamaño de las mismas, su geometría y la posibilidad de ionizarse o asociarse entre sí hace que muchos sistemas tengan un comportamiento no ideal en cualquier condición física, es decir, para cualquier combinación posible de variables de estado en las que pueda existir el sistema como tal.

Otros sistemas no se apartan o solo se apartan poco del comportamiento ideal en determinadas condiciones, pero cuando se cambia el estado del sistema modificando sustancialmente los valores de sus variables de estado comienzan a

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

comportarse de modo progresivamente menos ideal para terminar siendo no ideales en condiciones extremas.

Este comportamiento influye directamente sobre los métodos apropiados para la estimación de las propiedades de la mezcla. Por ejemplo, las moléculas de simetría esférica como el CH_4 se pueden describir bien mediante una ecuación de estado basada en dos parámetros. Las moléculas no esféricas y las moléculas débilmente polares también se pueden describir mediante una ecuación de dos parámetros, pero las desviaciones del comportamiento real con respecto al que predicen las ecuaciones son lo suficientemente grandes en las zonas de interés práctico como para justificar el uso de un tercer parámetro, tal como el factor acéntrico.

En este capítulo estudiamos los métodos de predicción de propiedades termodinámicas relacionando cada método con el grado de no idealidad que se le puede adjudicar al sistema.

VII.1.2 Equilibrio líquido-vapor

En esta sección trataremos las propiedades termodinámicas que permiten caracterizar el equilibrio de fases líquido-vapor. Este tiene gran importancia en las operaciones de separación basadas en la diferencia relativa de volatilidades, como ser evaporaciones flash, destilación, absorción, extracción, etc. El diseño de los equipos usados en estas operaciones requiere un conocimiento cuantitativo lo más exacto posible de las propiedades parciales de equilibrio de los componentes de una mezcla. Cuando ello es posible, estas estimaciones se deben basar en datos experimentales confiables para la mezcla particular en estudio, a las condiciones de presión, temperatura y composición que nos interesan.

Pero dada la enorme cantidad de mezclas posibles que existen en la práctica, no siempre se pueden conseguir datos experimentales que cumplan con los requisitos de calidad, cantidad y rango de propiedades de estado necesarios. Por eso es que se han desarrollado técnicas estimativas destinadas a evaluar las propiedades termodinámicas que permiten caracterizar el equilibrio de fases. La principal dificultad con que nos encontramos al intentar evaluar las propiedades termodinámicas de equilibrio de fases en una mezcla de composición desconocida es que resulta mucho más complicado que evaluar la misma propiedad en una mezcla de composición conocida o en un fluido puro. En un fluido puro o en una mezcla en la que la composición es constante nos interesa evaluar la propiedad como un todo, mientras que en una mezcla de composición desconocida nos interesa evaluar las propiedades parciales de los componentes de la mezcla. Esto es así porque en general no conocemos la composición que caracteriza el equilibrio.

Entonces el problema se hace más complejo, porque aparecen montones de variables que son las respectivas composiciones de cada componente en cada fase. No debe extrañar entonces que los cálculos de equilibrio de fases sean a menudo más difíciles y menos exactos que otros que podemos encontrar en el diseño de procesos químicos. Por eso se ha dedicado un enorme esfuerzo al tratamiento de este tema con

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

varios miles de artículos de revistas y centenares de libros publicados, y día a día se publica más. En consecuencia no podemos siquiera resumir la enorme cantidad de material que existe sobre la estimación de propiedades termodinámicas de equilibrio de fases en dos capítulos de un libro. Se recomienda mantenerse actualizado sobre este tema, ya que la gran cantidad de investigaciones que se realizan seguramente dejará obsoleto a corto plazo la mayor parte de los métodos que trataremos aquí. En última instancia, el buen juicio del ingeniero es el que dictará cuál de los muchos métodos resulta más apropiado para una situación particular, y el buen juicio sólo se obtiene con la experiencia.

A continuación analizaremos brevemente los métodos clásicos para la estimación de la constante de equilibrio para mezclas multicomponentes, o lo que es lo mismo, las propiedades directamente relacionadas para su cálculo, como ser coeficientes de actividad, de fugacidad, presiones de vapor, etc. Según comentamos en el Capítulo VI, históricamente se han desarrollado, entre muchos enfoques, dos tipos de modelos. Uno está basado en las ecuaciones de estado, que en un mayor o menor grado son correcciones a la conocida ecuación de Van der Walls (introduciendo nuevos parámetros o formas a la relación P-V-T). El otro enfoque trata de estimar el comportamiento de la mezcla en el equilibrio líquido-vapor a partir de una estimación de no-idealidad del líquido, ya sea mediante modelos empíricos para la estimación del coeficiente de actividad como por medio de un estudio o modelo de la fase líquida que nos provea una relación funcional para la misma.

En lo que sigue se tratará de relacionar a los métodos a utilizar, más que por su origen en una u otra filosofía, por su grado de relación y coherencia con la hipótesis de idealidad o grado de no idealidad de la mezcla a la que se pueden aplicar.

Antes de pasar a las metodologías propuestas para el cálculo de la constante de equilibrio líquido-vapor, analizaremos brevemente la estimación de la presión de vapor de una mezcla líquida, ya que es un paso imprescindible para el cálculo de la referida constante. Más aún, en los casos en que la fase vapor pueda considerarse ideal (lo que constituye una gran proporción de los casos prácticos) su cálculo involucra una gran porción de la tarea, ya que luego debe uno abocarse a la estimación de los coeficientes de actividad en la fase líquida, si ésta es no-ideal.

VII. 2. CORRELACIONES PARA LA ESTIMACIÓN DE LA PRESIÓN DE VAPOR

Las correlaciones para presión de vapor se dividen en dos clases según la base sobre la que se sustentan en correlaciones de base teórica y de base empírica. Las correlaciones que revisaremos son la de Antoine, Thodos, Gomez-Nieto y Thodos, Lee y Kesler y Riedel, Planck y Miller.

VII.2.1 Ecuación de Antoine

La correlación de Antoine (1888) es una ecuación hiperbólica, de la siguiente forma:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$Log_{10}\ Pv = A - \frac{B}{T - C} \qquad T\ en\ °K \qquad \textbf{(1)}$$

La ecuación de Antoine no se debe usar si Pv > 1500 mm Hg pues el error crece. Dentro de su rango de aplicación proporciona muy buena exactitud. Los valores de las constantes se pueden hallar a partir de datos T-Pv en tres puntos o más, resolviendo el sistema de ecuaciones correspondiente. Además existen en la bibliografía (Perry, 6ta. ed), (Reid y col.) extensas listas de constantes.

VII.2.2 Ecuación de Miller modificada

Esta ecuación, al igual que la de Antoine, tiene sólo dos constantes. Por ello resulta muy atractiva para extrapolar o interpolar datos a partir de una cantidad limitada de puntos experimentales sobre la curva de presión de vapor-temperatura.

$$\ln Pvr = \frac{A}{Tr}\,[1 - Tr^2 + B(3 + Tr)(1 - Tr)^3] \qquad \textbf{(2)}$$

Donde el subíndice r indica propiedad evaluada en el "estado reducido".
Para obtener mejores resultados se recomienda utilizar técnicas de ajuste fijando como variables de ajuste las constantes A, B y Pc (Reid y col.).

VII.2.3 Ecuación de Wagner

Esta ecuación es recomendada en la ref. (Reid y col.) por su excelente capacidad de representación de datos de presión de vapor-temperatura. Se recomienda para extrapolar datos conocida la curva de presión de vapor-temperatura, o una cantidad suficiente de puntos pertenecientes a la curva. En la misma referencia se encuentran tabulados los coeficientes de la ecuación de Wagner para una gran cantidad de sustancias.

$$\ln Pvr = \frac{A\tau + B\tau^{1.5} + C\tau^3 + D\tau^6}{Tr} \qquad \textbf{(3)}$$

donde $Pvr = \frac{Pv}{Pc}$, $\tau = 1 - Tr$.

VII.2.4 Ecuación de Frost-Kalkwarf-Thodos

Esta ecuación, al igual que la anterior, se puede emplear tanto para predecir

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

valores como para extrapolarlos a partir de algunos valores conocidos. En (Reid y col.) están tabulados los coeficientes de la ecuación de Frost-Kalkwarf-Thodos.

$$\ln Pv = A - \frac{B}{T} + C \ln T + \frac{D\ Pv}{T^2} \qquad \textbf{(4)}$$

A diferencia de la anterior, el cálculo mediante la ecuación de Frost-Kalkwarf- Thodos requiere un procedimiento recursivo puesto que no es una ecuación explícita.

VII.2.5 Ecuación de Lee y Kesler

La ecuación de Lee y Kesler se basa en la correlación generalizada de Pitzer y col.

$$\ln Pvr = f^{*}(Tr) + \omega\, f^{1}(Tr)$$

$$f^{*}(Tr) = 5.92714 - \frac{6.09648}{Tr} - 1.28862 \ln Tr + 0.169347\ Tr^{6} \qquad \textbf{(5)}$$

$$f^{1}(Tr) = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tr} - 13.4721 \ln Tr + 0.43577\ Tr^{6}$$

La expresión de Lee-Kesler para el factor acéntrico es:

$$\omega = \alpha/\beta$$

$$\alpha = -\ln(Pc) - 5.97214 + \frac{6.09648}{Tbr} + 1.28862 \ln(Tbr) - 0.169347\ Tbr^{6} \qquad \textbf{(6)}$$

$$\beta = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tbr} - 13.4721 \ln(Tbr) + 0.43577\ Tbr^{6} \qquad \textbf{(7)}$$

Pvr = Pv/Pc, Tr = T/Tc, Tbr = Tb/Tc, (Pc en ata). Tb temperatura de ebullición normal (a Pat). Esta ecuación no se debe usar para sustancias polares o asociadas. La ecuación de Lee-Kesler da resultados bastante buenos para temperaturas dentro del intervalo Tb a Tc con un error dentro del 1-2%. Si T < Tb la presión de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

vapor calculada es menor a la real en varias unidades por ciento.

VII.2. 6 Ecuación de Gómez-Nieto y Thodos

La ecuación de Gómez-Thodos tiene un rango de validez muy amplio y puede aplicarse para estimar presiones de vapor de sustancias polares, no polares y asociadas.

$$\ln Pvr = \beta \left[\frac{1}{Tr^{m}} - 1 \right] + \gamma \; [Tr^{7} - 1] \qquad \textbf{(8)}$$

$$a = \frac{\dfrac{1}{Tbr} - 1}{1 - Tbr^{7}} \qquad \textbf{(9)}$$

$$b = \frac{\dfrac{1}{Tbr^{m}} - 1}{1 - Tbr^{7}} \qquad \textbf{(10)}$$

$$s = \frac{Tb \; \ln(Pc)}{Tc - Tb} \qquad (Pc \;\; en \;\; ata) \qquad \textbf{(11)}$$

$$s = Tbr \; \frac{\ln(Pc/1.01325)}{1 - Tbr} \qquad (Pc \;\; en \;\; bar) \qquad \textbf{(12)}$$

$$m = 0.78425 \; \exp(0.089315 \; s) - \frac{8.5217}{\exp(0.78426 \; s)} \qquad \textbf{(13)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\gamma = a\ s + b\ \beta \qquad \textbf{(14)}$$

$$\beta = -4.267 - \frac{221.79}{s^{2.5}\exp(0.0384\ s^{2.5})} + \frac{3.8126}{\exp(2272.44/s^{3})} + \Delta^{*} \qquad \textbf{(15)}$$

donde Δ =0 excepto para el He (Δ =0.41815), H (Δ =0.19904) y Ne (Δ=0.02319). Las tres ecuaciones anteriores para m, γ y ß son válidas para compuestos no polares. Para compuestos polares que no forman puente de hidrógeno, incluyendo al amoníaco y al ácido acético, m y ß se calculan de las siguientes relaciones.

$$m = 0.466\ Tc^{0.166}$$

$$\gamma = 0.08594\ \exp(7.462\ 10^{-4}\ Tc)$$

Para sustancias que forman puente de hidrógeno (como el agua y los alcoholes):

$$m = 0.0052\ M^{0.29}\ Tc^{0.72}$$

$$\gamma = \frac{2.464}{M}\ \exp(9.8\ 10^{-6}\ M\ Tc)$$

donde M es el peso molecular del monómero. Para estas dos categorías de sustancias, ß se obtiene de la ecuación que define a γ, es decir:

$$\beta = \frac{\gamma - a\ s}{b}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo (Tomado de Reid y col.)
Calcular la presión de vapor del isopropanol a 450 °K. El valor experimental es 16.16 bar. Comparar los resultados usando los métodos que hemos examinado.

Datos

M=60.096	Tb=355.4 °K	Tc=508.3 °K	Pc=47.6 bar	Vc=220 $cm^3/gmol$
Zc=0.248	ω=0.665			

Constantes de la ecuación de Antoine:

A = 8.11820	B = 1580.920	Tmin = 000 °C	Pv en mm Hg
C = 219.620		Tmax = 101 °C	T en °C

Constantes de la ecuación de Wagner:

A = -8.16927	B = $-9.43213.10^{-2}$	Tmin = 250 °K	Pv en bar
C = -8.10040	D = 7.85	Tmax = 508 °K	T en °K

Solución
1) ecuación de Antoine

$$\log_{10} Pv = A - \frac{B}{T + C} = 8.11820 - \frac{1580.920}{176.7 + 219.620} = 4.1292012$$

$$Pv = 10^{4.1292012} = 13464.84 \ mmHg = 17.94 \ bar \qquad Error = 11.01\%$$

2) ecuación de Wagner

$$Tr = \frac{T}{Tc} = \frac{450}{508.3} = 0.8853 \Rightarrow \tau = 1 - Tr = 0.114696$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\ln\ Pvr = \frac{A.\tau + B.\tau^{1.5} + C.\tau^{3} + D.\tau^{6}}{Tr} = -1.07732983 \Rightarrow Pvr = 0.34085$$

Pv = Pvr.Pc ≅ 0.34085 (47.6) = 16.22 bar   Error =0.37 %

3) ecuación de Lee-Kesler

$$Tbr = \frac{Tb}{Tc} = \frac{355.4}{508.3} = 0.699$$

$$f^{1}(Tr) = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tr} - 13.4721\ \ln\ Tr + 0.43577\ Tr^{6} =$$

$$= 15.2518 - \frac{15.6875}{0.8853} - 13.4721\ \ln(0.8853) + 0.43577\ (0.8853)^{6} =$$

$$= -0.6170713$$

$$\alpha = -\ln(Pc) - 5.97214 + \frac{6.09648}{Tbr} + 1.28862.lnTbr - 0.169347.Tbr^{6} =$$

$$= -\ln(47.6) - 5.97214 + \frac{6.09648}{0.699} + 1.28862.\ln(0.699) - 0.169347.0.699^{6} =$$

$$= -1.5965587$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$f°(Tr) = 5.92714 - \frac{6.09648}{Tr} - 1.28862 \ln Tr + 0.169347\ Tr^6 =$$

$$= 5.92714 - \frac{6.09648}{0.8853} - 1.28862.\ln(0.8853) + 0.169347.0.8853^6 =$$

$$= -0.7206549$$

$$\beta = 15.2518 - \frac{15.6875}{Tbr} - 13.4721.\ln Tbr + 0.43577.Tbr^6 =$$

$$= 15.2518 - \frac{15.6875}{0.699} - 13.4721.\ln(0.699) + 0.43577.0.699^6 = -2.3131601$$

$$\varpi = \frac{\alpha}{\beta} = \frac{-1.5965587}{-2.3131601} = 0.69$$

$$\ln Pvr = f°(Tr) + \varpi\ f^1(Tr) = -0.7206549 - 0.6170713.0.69 = -1.1464341$$

Pvr = exp(-1.1464341) = 0.3177678, ⇒ Pv = Pvr:Pc = 15.13 bar, Error = -6.37 %

4) ecuación de Gómez-Nieto y Thodos

$$s = Tbr \frac{\ln(Pc/1.01325)}{1 - Tbr} = 0.699 \frac{\ln(47.6/1.01325)}{1 - 0.699} = 8.9399308$$

Por ser una especie que forma puente de hidrógeno

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

m = 0.0052 $M^{0.29}$.$Tc^{0.72}$ = 0.0052.$60.096^{0.29}$.$508.3^{0.72}$ = 1.5145201

$$\gamma = \frac{2.464}{M} \exp(9.8.10^{-6} M\ Tc) = \frac{2.464}{60.096} \exp(9.8.10^{-6}.60.096.508.3) =$$

$$= 0.0553101$$

$$a = \frac{\dfrac{1}{Tbr} - 1}{1 - Tbr^{7}} = \frac{\dfrac{1}{0.699} - 1}{1 - 0.699^{7}} = 0.4688418$$

$$b = \frac{\dfrac{1}{Tbr^{m}} - 1}{1 - Tbr^{7}} = \frac{\dfrac{1}{0.699^{1.5145201}} - 1}{1 - 0.699^{2}} = 0.7839763$$

$$\beta = \frac{\gamma - a.s}{b} = \frac{0.0553101 - 0.4688418(8.9399308)}{0.839763} = -5.2758007$$

$$\ln\ Pvr = \beta \left[\frac{1}{Tr^{m}} - 1\right] + \gamma\ [Tr^{7} - 1] =$$

$$= -5.2758007 \left[\frac{1}{0.8853^{1.5145201}} - 1\right] + 0.0553101\ [0.8853^{7} - 1] = -1.1008$$

Pvr = exp(-1.1008) = 0.3326118 → Pv = Pvr(Pc) = 15.83 bar , Error = -2.04 %

Discusión de los resultados

Los errores se resumen en la siguiente tabla:

Método	Antoine	Wagner	Lee-Kesler	Gómez-Thodos
Error %	11.01	0.37	-6.37	-2.04

Observamos que los errores más elevados se deben a las siguientes causas: en la ecuación de Antoine los coeficientes son válidos para el intervalo $0 \leq T \leq 101°C$ pero la temperatura es en este caso 450 °K = 176.7 °C. No se puede esperar mucha exactitud si se usa la ecuación de Antoine fuera de su rango de validez. En el caso de la ecuación de Lee-Kesler debemos recordar que no es exacta para sustancias polares o asociadas, como es el caso del isopropanol. El error del método de Gómez-Thodos es bastante razonable considerando que se trata de un método estimativo que opera con muy poca información.

Concluyendo, si bien no hemos revisado la totalidad de las ecuaciones y correlaciones disponibles ya que se han publicado varias decenas de ellas, hemos tratado de listar las más exactas y generales, en las que además la cantidad de datos que se necesitan para aplicarlas se reduce al mínimo. En (Reid y col.), si se dispone de las constantes de alguna de las ecuaciones explicadas en los puntos 2.1, 2.3 o 2.4 se recomienda emplear preferentemente estas ecuaciones. Se recomienda la ecuación de Antoine en el rango de presiones y temperaturas en el que fueron obtenidas las constantes, es decir, no se aconseja usarla para extrapolar. La ecuación de Wagner se puede usar para extrapolar hasta una temperatura reducida de menos de 0.5, o hasta el valor mínimo que figura listado en las tablas de (Reid y col.). Si $Tr < 0.5$ se recomienda usar la ecuación de Lee-Kesler. Excepto para los alcoholes, el error debiera ser menor del 30% con cualquiera de estas técnicas. Si se desea obtener mayor exactitud a bajas temperaturas se debe emplear la ecuación de Miller modificada. Para $Tr > 0.5$ se recomienda el uso de la ecuación de Gómez-Thodos.

Ninguno de los métodos que hemos revisado se puede utilizar para estimar o predecir presiones de vapor de compuestos de peso molecular elevado. Cuando se conoce la composición de una sustancia de este tipo se puede emplear una estimación basada en el método UNIFAC y otras técnicas de contribución de grupos. La exactitud no es muy buena con estos métodos.

VII.2.7 Estimación de presión de vapor de cortes de petróleo

La estimación cada vez más precisa de las presiones de vapor de cortes de hidrocarburos pesados es una necesidad imperiosa que surge de la exactitud cada vez mayor de los procedimientos de control de procesos en la industria petroquímica. Los métodos de predicción de propiedades termodinámicas de fracciones de petróleo han sido tradicionalmente de tipo gráfico. Entre otras podemos citar la técnica de Maxwell-Bonnell que data de 1957. El Technical Data Book del API proporciona un método gráfico y analítico que resulta adecuado para cálculos manuales pero poco

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

apropiado para simulaciones computacionales; además tiende a perder exactitud para cortes más pesados. Por otra parte el cálculo para factores de caracterización de Watson distintos de 12 se hace por iteraciones lo que complica considerablemente el proceso.

Existen nuevos enfoques como el propuesto por (Lee y Kesler, 1980) que dadas las limitaciones de espacio no podemos reproducir aquí. No obstante, se enfatiza que este campo, la estimación de propiedades de cortes de petróleo es todo un mundo particular, y existen innumerables métodos propuestos para estimar todas las propiedades. En general la mayoría de los mismos se encuentran implementados en los simuladores comerciales.

VII.3. EQUILIBRIO LIQUIDO-VAPOR EN SISTEMAS SEMI-IDEALES

Estudiaremos las propiedades termodinámicas que caracterizan el equilibrio de fases en sistemas semi-ideales, revisando su comportamiento y los distintos métodos en distintas condiciones de sus variables de estado, fundamentalmente la presión y la temperatura. No las deduciremos ni daremos sus fundamentos termodinámicos que se suponen conocidos.

VII.3.1. Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a bajas presiones

Estas condiciones son habituales en muchas operaciones de separación que se realizan a baja presión (digamos por ejemplo a menos de 5-6 atmósferas) o en un vacío parcial, donde las leyes de las mezclas ideales son válidas siempre que no haya especies fuertemente polares en la mezcla y que las que la integran tengan esencialmente los mismos tamaños y fuerzas intermoleculares. Un ejemplo de este tipo de aplicaciones lo constituyen las mezclas de hidrocarburos de peso molecular parecido y a temperaturas no muy bajas ya que a temperaturas criogénicas se presenta nuevamente un comportamiento no ideal bastante marcado.

Como es conocido, para describir la relación entre la composición de líquido y vapor en una mezcla multicomponete es habitual el uso de la constante de equilibrio (K), que en su forma general se define según (ver Capítulo VI).

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i^L \, f_{i,L}^0}{\Phi_i^v \, P} \qquad \textbf{(16)}$$

donde γ_i^L es el coeficiente de actividad, Φ el de fugacidad, y $f^{\circ}_{i,L}$ es la fugacidad del líquido en un estado de referencia.

En las condiciones que hemos especificado para la mezcla, tanto γ_i^L como Φ_i^v son iguales a uno. Además a bajas presiones $f^0_{i,L}$ tiende a $P_{v,i}$, siempre que no haya asociaciones o disociaciones en la fase vapor, y entonces resulta la siguiente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

simplificación aproximativa:

$$K_i = P_{v,i}/P \tag{17}$$

donde $P_{v,i}$ es la presión de vapor de saturación del componente i (para la cual hemos analizado métodos de estimación en la sección anterior) y P es la presión de la mezcla. Esta expresión se suele llamar "K ideal" o "K de Raoult".

Para la construcción de modelos para simulación de sistemas ideales a bajas presiones y temperaturas moderadas se pueden usar los métodos más simples de estimación y predicción de propiedades termodinámicas. La estimación de presiones de vapor de sustancias puras se puede hacer fácilmente, según vimos, mediante la ecuación de Antoine, por ejemplo.

VII.3.2. Propiedades termodinámicas de mezclas ideales a presiones bajas a moderadas

Para mezclas ideales en las que las especies químicas que la integran son apolares y aproximadamente del mismo tamaño y las presiones son de bajas a moderadas con temperaturas moderadas, todavía es posible asumir que los coeficientes de actividad son unitarios, pero las leyes de gases ideales ya no son válidas. Por lo tanto, ahora la ecuación para la constante K puede aproximarse según:

$$K_i = \frac{f_{i,L}^0}{\Phi_i^v \, P} \tag{18}$$

Las relaciones termodinámicas para las soluciones ideales se aplican principalmente a las mezclas de compuestos no polares a presiones bajas y moderadas, en particular a las mezclas de hidrocarburos parafínicos y olefínicos.

Dado que en la ecuación (18) lo que debemos corregir es la desviación de la fase gas respecto al comportamiento ideal, no es de extrañar que sean de aplicación las ecuaciones de estado, aunque el uso de muchas de estas no se limite sólo a la fase gas, ya que también pueden utilizarse para calcular el volumen específico del líquido en equilibrio con el vapor, por ejemplo, si la relación PVT describe adecuadamente ambas fases. Para el cálculo del coeficiente de fugacidad se pueden utilizar ecuaciones de estado de dos y tres parámetros para describir por ejemplo el comportamiento de las mezclas no ideales de hidrocarburos, como veremos a continuación.

En general se prefiere la ecuación de Soave-Redlich-Kwong (una modificación de tres parámetros de la ecuación de Redlich-Kwong de dos parámetros) en vez de esta última. Tanto las ecuaciones de R-K y de S-R-K como las de Peng y Robinson, Benedict Webb y Rubin y de Lee-Kesler se han usado con mayor o menor

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

éxito para modelar este tipo de mezclas. Vamos a describir el empleo de la ecuación de S-R-K, y lo que digamos para esta es válido para las demás, ya que aunque existen diferencias por la distinta estructura de las otras ecuaciones, el principio es el mismo para todas.

Como sabemos, la ecuación de S-R-K es una modificación de la ecuación de R-K. Su estructura es la siguiente.

$$P = \frac{R\ T}{v - b} - \frac{a}{v(v + b)} \qquad \textbf{(19)}$$

donde:

$$a = \frac{0.42748\ R^2\ Tc^2}{Pc}\ [1 + m(1 - \sqrt{Tr})]^2$$

$$m = 0.480 + 1.574\ \omega - 0.176\ \omega^2$$

$$b = \frac{0.08664\ R\ Tc}{Pc}$$

Es costumbre calcular las diversas propiedades termodinámicas a través del factor de compresibilidad (Z = PV/RT). De las relaciones anteriores y a partir de su definición, esto se puede calcular según:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)\ Z - AB = 0 \qquad \textbf{(20)}$$

$$A = \frac{a\ P}{(R\ T)^2}\ ; \qquad B = \frac{b\ P}{(R\ T)}$$

Las constantes *a* y *b* de la mezcla se obtienen mediante las siguientes reglas de mezclado válidas para mezclas de sustancias no polares:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$a = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} y_i \, y_j \, a_{ij}$$

$$a_{ij} = (1 - k_{ij}) \sqrt{a_i \, a_j} \qquad (k_{ij} = 0)$$

$$b = \sum_{i=1}^{NC} y_i \, b_i$$

donde:

$$a_i = \frac{0.42748 \, (R \, Tc_i)^2}{Pc_i} \, [1 + m_i \, (1 - \sqrt{Tr_i})]^2$$

$$b_i = \frac{0.08664 \, (R \, Tc_i)}{Pc_i}$$

$$m_i = 0.480 + 1.574\omega_i - 0.176\omega_i^2$$

La ecuación (20) se debe resolver por un procedimiento iterativo. Para la condición de equilibrio líquido-vapor se obtienen dos raíces reales, que corresponden al factor de compresibilidad Z^V para la fase vapor y al factor de compresibilidad Z^L para la fase líquida. Para cada fase y para cada componente estamos ahora en condiciones de calcular las siguientes propiedades termodinámicas: coeficiente de fugacidad del componente i puro y el coeficiente de fugacidad del componente i en la mezcla Φ_i^v. Las ecuaciones que permiten calcularlas son:

$$\Phi_i^0 = \exp \left[(Z - 1) - \ln(Z - B) - \frac{A}{B} \ln \left(\frac{Z + B}{Z} \right) \right]$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\Phi_i = \exp\left[(Z - 1)\frac{b_i}{b} - \ln(Z - B) - \frac{A}{B}\left[\frac{2\sqrt{a_i}}{\sqrt{a}} - \frac{b_i}{b}\right]\ln\left(\frac{Z + B}{Z}\right)\right] \quad \textbf{(21)}$$

El uso de los parámetros de interacción binaria k_{ij} en las ecuaciones anteriores permite aplicar la ecuación S-R-K no solo a mezclas de hidrocarburos (para las cuales $k_{ij} = 0$) sino también para mezclas de hidrocarburos con sustancias de estructura química distinta, tales como el nitrógeno, monóxido de carbono, dióxido de carbono y sulfuro de hidrógeno, pero no con el hidrógeno.

Una vez conseguida la convergencia del proceso iterativo, es posible obtener los valores de las constantes de vaporización en el equilibrio K mediante la ecuación (18).

También se suele usar la ecuación de Peng-Robinson para generar modelos para la simulación del equilibrio líquido-vapor en sistemas de estas características. La ecuación P-R da tan buenos resultados como la S-R-K en sistemas de hidrocarburos livianos y pesados (> C_5) así como mezclas de hidrocarburos livianos no polares con SH_2 (hasta 25 moles% de SH_2) y de H_2 con hidrocarburos livianos.

En las cercanías de la región crítica la ecuación S-R-K proporciona resultados menos exactos que la ecuación P-R. La exactitud de los valores que predicen ambas ecuaciones para densidad de líquido no es muy buena, ya que normalmente suelen estar un 10 a 20% por debajo de los valores experimentales.

Otra ecuación que se suele usar en la práctica es la de Benedict, Webb y Rubin. Existen muchas variantes de la ecuación B-W-R, una de las cuales está lejanamente emparentada con ésta y se conoce como ecuación de Lee-Kesler. Se han hecho intentos para modificar la ecuación B-W-R para que pueda describir mezclas no ideales, pero resulta un modelo matemáticamente complejo, y muchos prefieren formas más simples como P-R o S-R-K. Las formas más comunes y sencillas de la ecuación B-W-R tienen entre 8 y 11 constantes para cada componente de la mezcla. Fue diseñada especialmente para describir propiedades de mezclas de hidrocarburos livianos (< C_5) con el nitrógeno, hidrógeno y SH_2 . Funciona mejor en la zona de temperaturas menores de 200 °F y presiones menores de 2000 psi, lo que la hace muy apropiada para simular el comportamiento del equilibrio líquido-vapor de gas natural licuado, gas natural y gas de petróleo.

La ecuación de Lee-Kesler ha sido menos favorecida por la complejidad matemática y algorítmica que demandan los cálculos, ya que es esencialmente recursiva en su estructura. El campo de aplicación de la ecuación L-K es aproximadamente el mismo de la ecuación B-W-R pero su exactitud es mayor.

Dentro de este contexto, podemos concluir en que se pueden usar ecuaciones de estado de dos y tres parámetros para describir el comportamiento de las mezclas ideales a presiones bajas a moderadas, así como otros modelos que estudiaremos en la siguiente sección. Las ecuaciones de estado funcionan muy bien

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

en mezclas de especies químicas de estructura análoga, como hidrocarburos parafínicos y no saturados. Las aplicaciones típicas para las que se recomiendan estos modelos son: simulación de desmetanizadores, despropanizadores y desbutanizadores, separadores etano-etileno, separadores propano-propeno y absorbedores de productos livianos. Tanto la ecuación L-K como la B-W-R se emplean mucho en la simulación de los procesos de separación de hidrógeno y helio de gas natural, de licuefacción de gas y de simulación de procesos de baja temperatura que usan naftas livianas.

VII.4. EQUILIBRIO DE FASES EN SISTEMAS NO IDEALES

La no idealidad de los sistemas líquido-vapor se presenta por diversas causas, por efecto del tamaño, masa, estructura y existencia de grupos polares de las moléculas que impiden usar los modelos simples que hemos expuesto en las secciones anteriores.

La causa más frecuente de no idealidad de la mezcla es la no idealidad de la fase líquida. Si la presión del sistema es alta, además existirá no idealidad de la fase vapor. Si hay presentes especies polares, ambas fases se alejan fuertemente de la idealidad. En consecuencia, deberemos usar modelos especialmente diseñados para representar sistemas no ideales cuando: a) la presión es elevada; b) la fase líquida es no ideal; c) hay especies polares en la mezcla. De estas causas de no idealidad, como ya hemos dicho la más frecuente es la segunda, aunque también existen casos de interés práctico para el ingeniero químico que combinan dos o más causas.

Si hay presentes sustancias que contienen grupos capaces de formar fuertes enlaces de hidrógeno, la fase vapor se comportará de un modo tan alejado de la idealidad que las ecuaciones de tres o más parámetros (P-R, S-R-K, B-W-R, L-K) no son capaces de describir adecuadamente su comportamiento, y se deberá usar un modelo especialmente diseñado para tales casos. Las sustancias que pueden causar este comportamiento en la fase vapor son ciertos alcoholes, aldehídos, ácidos y ésteres que tienden a formar dímeros, trímeros y codímeros en fase vapor.

En cuanto a las sustancias polares que causan no idealidad de la fase líquida, se pueden encontrar en la industria muchas sustancias capaces de producir este problema. Todas las moléculas que contienen átomos de hidrógeno unidos a átomos donantes de electrones (O, N, F, Cl y en ciertos casos C) presentan un momento dipolar de mayor o menor intensidad. La siguiente clasificación (Tabla tomada de Henley y Seader) permite estimar en forma cualitativa la magnitud de la desviación respecto de la idealidad esperable en una mezcla que contenga ciertas moléculas. Las que se desvían con mayor intensidad del comportamiento ideal son las que figuran en primer término.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Clase	Descripción	Ejemplos
I	Moléculas capaces de formar redes tridimensionales de átomos ligados por puentes de hidrógeno fuertes	Agua, glicerina, alcoholes que contengan grupos amina, hidroxilaminas, hidroxiácidos y aminas en general
II	Otras moléculas conteniendo átomos activos de hidrógeno combinados con átomos donantes de electrones (O, N, F).	Alcoholes, ácidos, fenoles, aminas primarias y secundarias, oximas, compuestos de nitrógeno con grupos nitro y nitrilo con átomos de hidrógeno α, amoníaco, hidrazina, fluoruro de hidrógeno y cianuro de hidrógeno
III	Moléculas conteniendo átomos donantes de electrones pero no átomos activos de hidrógeno.	Eteres, cetonas, aldehídos, esteres, aminas terciarias incluyendo el tipo piridínico y compuestos de nitrógeno con grupos nitro y nitrilo sin átomos de hidrógeno α.
IV	Moléculas que contienen átomos de hidrógeno activos pero no dadores, que contienen además dos o tres átomos de cloro en el mismo átomo de carbono en que tiene un átomo de hidrógeno, o un átomo cloror en el mismo átomo de carbono y uno o más átomos de cloro en átomos de carbono adyacentes.	$CHCl_3$, CH_2Cl_2, CH_3CHCl_2, CH_2ClCH_2Cl...
V	Todas las otras moléculas que no contienen ni átomos activos de hidrógeno ni átomos donantes de electrones.	Hidrocarburos, disulfuro de carbono, sulfuros, mercaptanos y halohidrocarburos que no figuran en la Clase IV.

La siguiente tabla permite estimar en forma cualitativa la magnitud de la desviación de la idealidad de mezclas binarias con respecto a la ley de Raoult. Desviaciones positivas corresponden a valores de $\gamma_L > 1$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Tipo de Desviación	Clases	Efecto sobre el puente de H
Siempre negativa	III+IV	Sólo se forman puentes de H
Casi ideal; siempre positivas o ideal	III+III III+V IV+IV IV+V V+V	No hay puentes de H involucrados
Usualmente positiva, pero algunas negativas	I+I I+II II+II II+III	Se forman y rompen puentes de H débiles
Siempre positiva	I+IV (frecuentemente con solubilidad limitada) II+IV	Se forman y rompen puentes de H, pero la disociación de clase I y II es el efecto más importante.
Siempre positiva	I+V II+V	Sólo se rompen puentes de H.

La no idealidad resulta en una cantidad de variaciones del coeficiente de actividad en fase líquida con la composición que provoca las conocidas desviaciones respecto al comportamiento esperado según una mezcla ideal (valor unitario a toda composición, temperatura y presión). Típicos ejemplos de mezclas de este tipo son (etanol+ n-heptano) en donde el n-heptano (clase I) rompe los puentes de H del etanol (clase II), el sistema (acetona + formamida) en el que hay una desviación similar pero menos positiva, causada por la mezcla de una sustancia de clase III y otra de clase I, la mezcla cloroformo (IV) y metanol (II) en la que se forman y rompen constantemente puentes de H, resultando en una desusada desviación positiva de la curva del cloroformo que pasa por un máximo a escasa concentración, el sistema (cloroformo y acetona) (III) donde el cloroformo provee átomos de hidrógeno activos a la acetona, en la que el grupo carbonilo está en condiciones de aceptarlos, produciendo desviaciones negativas, y por último, el sistema butanol (II) y agua (I), en el cual ambas moléculas son formadoras de puente de hidrógeno, de modo que se rompen los mismos generando una no idealidad tan fuerte que origina separación de fases. Los sistemas de esta última clase son tan extremadamente no ideales que normalmente se presenta inmiscibilidad parcial. En sistemas tan fuertemente no ideales se pueden presentar otros problemas como la formación de azeótropos.

Los modelos que han demostrado ser más exitosos para describir el comportamiento de las mezclas no ideales son los que se basan en la correlación del coeficiente de actividad en la fase líquida, ya que justamente es ésta la que provee por

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

lo general la mayor desviación al comportamiento ideal. En general, como ya mencionamos estos modelos se basan en la estimación del coeficiente de actividad por medio de fórmulas empíricas o bien mediante modelos a nivel molecular de la fase líquida. Lamentablemente, estos modelos son bastante más complejos que los anteriores, basados en ecuaciones de estado.

En lo que sigue mencionaremos varios modelos, los más usuales, comenzando por las ecuaciones que calculan los coeficientes de actividad de la fase líquida. Estas ecuaciones son muy usadas porque aún a bajas presiones la no idealidad de la fase líquida puede ser muy marcada, de modo que constituyen un buen modelo para describir el comportamiento de mezclas no ideales que cubren una gran variedad de aplicaciones prácticas.

VII.4.1 Teoría de soluciones regulares y correlaciones de Chao-Seader y Grayson- Streed

En forma muy resumida, la teoría de soluciones regulares postula que en una mezcla binaria de sustancias no polares los coeficientes de actividad de los integrantes de la misma en la fase líquida se pueden expresar como la suma de dos contribuciones. La primera, llamada energía de vaporización isotérmica representa la energía necesaria para evaporar el líquido hasta el estado de gas ideal a temperatura constante. El segundo, denominado densidad de energía cohesiva, refleja las fuerzas intermoleculares de cada componente y es el más importante porque representa la tendencia a la no idealidad de la mezcla. Este término se puede describir en función de parámetros de solubilidad.

La teoría se basa fundamentalmente en la idea de que la no idealidad se debe a diferencias en las fuerzas de atracción de Van der Waals entre las especies presentes. Las soluciones regulares tienen un calor de disolución endotérmico ($\Delta H_s > 0$) y todos sus coeficientes de actividad mayores que 1. La denominación de regulares proviene de que se supone que las moléculas están distribuidas al azar, ya que no tienen direcciones preferenciales en las que tiendan a agruparse. Claro está, una solución regular no presenta puente de hidrógeno ni momentos dipolares importantes. Las fuerzas de atracción que actúan entre pares iguales y desiguales de moléculas tienden a causar la segregación de los mismos, pero esta segregación se supone que está contrarrestada por la energía térmica, con el resultado de que la concentración local de moléculas es idéntica a la concentración media.

Por lo tanto, la discrepancia de entropía es cero y la entropía de las soluciones regulares es igual a la de las soluciones ideales, en las que las moléculas se encuentran distribuidas al azar. Esto contrasta con las soluciones atérmicas en las que la discrepancia de entalpía es cero. Formalmente la teoría de las soluciones regulares es bastante compleja y no se presta para cálculos computacionales pero ha sido considerablemente simplificada y extendida por Chao y Seader a las mezclas de hidrocarburos en la forma que se conoce generalmente como correlación de Chao-Seader (C-S). En esencia la correlación permite describir los coeficientes de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

actividad de los componentes de una mezcla en la fase líquida en términos de los parámetros de solubilidad. Lo que hicieron Chao y Seader fue correlacionar estos parámetros en función de las variables de estado y el factor acéntrico, a partir de valores experimentales de coeficientes de actividad de mezclas conocidas, obteniendo expresiones polinómicas que permiten calcular los coeficientes de fugacidad y actividad. La ecuación de C-S para el coeficiente de actividad en fase líquida está dada en función del parámetro de solubilidad δ de cada especie que se encuentra tabulado (Reid y Sherwood) para la mayoría de las sustancias conocidas, y del volumen específico del líquido a 25 °C que se puede encontrar tabulado (Reid, Prausnitz y Poling) (Reid y Sherwood) o se puede calcular fácilmente.

Esta ecuación se puede expresar como caso particular de una más general, válida para la teoría de soluciones regulares, de la cual C-S es un caso particular. La ecuación general es:

$$RT \ \ln \gamma_L^L = \nu_i^L \ (\delta_i - \bar{\delta})^2 + \Delta \qquad \textbf{(22)}$$

donde δ_i es el parámetro de solubilidad de la sustancia i, $\bar{\delta}$ es un parámetro de solubilidad medio de la mezcla y Δ una corrección debida a los efectos no ideales de diversa índole. En el método C-S la corrección Δ se define en función del volumen molar de cada especie pero se puede expresar de otras maneras, por ejemplo en función de parámetros de interacción binaria.

En el caso particular de la ecuación propuesta por Chao-Seader tenemos:

$$\gamma_i^L = \exp\left\{ \frac{v_i^L \left[\delta_i - \sum_{j=1}^{NC} \Phi_j \ \delta_j \right]^2}{RT} + \ln\left(\frac{v_i^L}{v^L} \right) + 1 - \frac{v_i^L}{v^L} \right\} \qquad \textbf{(23)}$$

donde: δ_i es el parámetro de solubilidad de cada sustancia a 25 °C [(gr/cm^3)$^{0.5}$];

v_i^L es el volumen específico de líquido a 25 °C [cm^3/gmol];

v^L es el volumen específico medio de líquido de la mezcla a la temperatura de la misma y se calcula mediante la siguiente ecuación asumiendo que el volumen molar es aditivo.

$$v^L = \sum_{j=1}^{NC} x_j \ v_j^L \qquad \textbf{(24)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Φ es la fracción de volumen; se calcula mediante la siguiente ecuación.

$$\Phi_j = \frac{x_j \; v_j^L}{\sum_{j=1}^{NC} x_j \; v_j^L} = \frac{x_j \; v_j^L}{v^L} \tag{25}$$

En lo que respecta a los coeficientes de fugacidad de componente puro en ambas fases la correlación C-S los describe como polinomios en función de la presión y la temperatura. La correlación sigue la estructura definida originalmente por Pitzer y colaboradores:

$$\log \Phi_i^{\circ} = \log \Phi_i^{\circ(0)} + \varpi_i \log \Phi_i^{\circ(1)} \tag{26}$$

En particular para la fase líquida:

$$\log \Phi_i^{\circ(0)} = A_0 + \frac{A_1}{Tr_i} + A_2 \; Tr_i + A_3 \; Tr_i^2 + A_4 \; Tr_i^3 + \\ + (A_5 + A_6 \; Tr_i + A_7 \; Tr_i^2) \; Pr_i + (A_8 + A_9 \; Tr_i) \; Pr_i^2 - \log \; Pr_i \tag{27}$$

$$\log \Phi_i^{\circ(1)} = A_{10} + A_{11} \; Tr_i + \frac{A_{12}}{Tr_i} + A_{13} \; Tr_i^2 + A_{14} \; (Pr_i - 0.6) \tag{28}$$

Los coeficientes de la correlación original de Chao-Seader fueron revisados y corregidos por Grayson y Streed, cuya modificación se considera más exacta. Los coeficientes de la correlación de Grayson-Streed son los siguientes.

	Fluido simple (ω=0)	Metano	Hidrógeno
A_0	2.05135	1.36822	1.50709
A_1	-2.10899	-1.54831	2.74283
A_2	0	0	-0.02110
A_3	-0.19396	0.02889	0.00011
A_4	0.02282	-0.01076	0
A_5	0.08852	0.10486	0.008585
A_6	0	-0.02529	0
A_7	-0.00872	0	0
A_8	-0.00353	0	0
A_9	0.0203	0	0

Los coeficientes de orden 10 al 14 de la correlación original de Chao-Seader son los siguientes:

A_{10} = -4.23893 A_{12} = -1.22060

A_{11} = 8.65808 A_{13} = -3.15224 A_{14} = -0.025

Estos coeficientes no fueron modificados por Grayson y Streed.

La validez de las ecuaciones empíricas (27) y (28) es para el rango de temperaturas reducidas de 0.5 a 1.3. La correlación de C-S o G-S se complementa con la ecuación R-K que se recomienda para el cálculo del coeficiente de fugacidad en la fase vapor Φ^v .

Las temperaturas y presiones en las que se recomienda aplicar la correlación de G-S para obtener mejores resultados son las siguientes.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

a) temperaturas menores de 500 °F.
b) presiones menores de 1000 psia.
c) para hidrocarburos (excepto el metano) 0.5 < Tr < 1.3 y Pcm < 0.8 (donde Pcm es la presión pseudo crítica de la mezcla).
d) para sistemas que contengan metano y/o hidrógeno, la temperatura reducida promedio (ponderado en una base molar) será menor de 0.93 y la fracción molar del metano (o hidrógeno o la suma de ambos) será menor de 0.3. La fracción molar de otros gases disueltos será menor de 0.2.
e) Cuando se desea estimar valores de la constante de vaporización en el equilibrio K de parafinas u olefinas, la fracción molar de aromáticos en la fase líquida será menor de 0.5. En cambio cuando se desea estimar valores de K para aromáticos, la fracción molar de aromáticos en la fase líquida deberá ser mayor de 0.5.

En general, la correlación G-S da malos resultados en la zona criogénica y no se recomienda usarla cuando T < 0 °F. En esta zona las correlaciones basadas en ecuaciones de tres parámetros pueden dar mejores resultados. El método C-S con la modificación de G-S da resultados bastante razonables siempre que se respeten las limitaciones aconsejadas por la práctica. Puede dar resultados de gran exactitud, comparable con el margen de error experimental. En general, si se respetan las restricciones anteriores el resultado obtenido tiene un margen de error menor del 12.8%, esencialmente el doble del grado de incertidumbre de los datos experimentales. Pueden consultarse algunos resultados de un estudio clásico sobre la exactitud del método C-S en (Lenoir y Koppany, 1967).

En general los errores altos se obtienen cuando existen condiciones violatorias de alguna de las limitaciones establecidas. El efecto de la baja temperatura es decisivo. Se muestra que el efecto de la temperatura en la exactitud del método C-S, si se opera a temperaturas menores de 0 °F, aumenta el error promedio de 13 a 56%. La presencia de hidrógeno en las mezclas produce un aumento de la constante K para el hidrógeno y una disminución para el metano, etano y propano cuando el contenido de H es muy grande, pero el efecto de la temperatura y/o de la presión no es tan claro como en las mezclas en las que hay metano presente en grandes cantidades. Es difícil arriesgar un diagnóstico preciso del efecto que tendrá el hidrógeno en la exactitud de las predicciones del método C-S, excepto cuando están presentes el hidrógeno y el metano juntos. Esto es bastante frecuente en la práctica. En ese caso cuando la presión excede las 1000 psia los resultados son muy pobres, pero con una presión menor de 1000 psia mejoran mucho en calidad. El problema en general suele ser la temperatura ya que a menudo las mezclas que contienen metano e hidrógeno juntos suelen estar a temperaturas por debajo de -100 °F, y no se debe usar C-S para estas mezclas.

En conclusión, las reglas restrictivas para el uso de C-S se deben seguir escrupulosamente. Estas limitaciones todavía dejan un amplio margen de situaciones

en las que se puede aplicar C-S con seguridad y obtener una exactitud razonable.

Ejemplo *(Tomado de Reid y col.)*

Calcular los coeficientes de actividad en la fase líquida de los componentes de una mezcla de tolueno y n-heptano a 1 atm y 104.52 °C. Compararlos con los valores experimentales en el equilibrio que son: γ_h = 1.16, γ_t = 1.025. La composición de la mezcla en el equilibrio es: x_h = 0.2681, x_t = 0.7319.

Datos:

δ_h = 7.430 δ_t = 8.914 v_h^L = 147.5 , v_t^L = 106.8

Solución

Aplicando la ecuación (23) tenemos los siguientes términos:

$$v^L = \sum_{j=1}^{NC} x_j \, v_j^L = 0.2681.147.5 + 0.7319.106.8 = 117.71$$

$$\Phi_h = \frac{x_h \, v_t^L}{v^L} = \frac{0.2681.147.5}{117.71} = 0.3359$$

$$\Phi_t = \frac{x_t \, v_t^L}{v^L} = \frac{0.7319.106.8}{117.71} = 0.6641 = 1 - \Phi_h$$

En consecuencia:

$$\gamma_h^L = \exp\left(\frac{147.5(7.43 - (0.3359)7.43 - 0.6641(8.914)^2}{(1.987)377.67} + 1 - \frac{147.5}{117.71} + \ln \frac{147.5}{117.71} \right) =$$

$$= 1.1795$$

$$\gamma_t^L = \exp\left(\frac{106.8(8.914) - 0.3359(7.43) - 0.6641(8.914)^2}{(1.987)377.67} + 1 - \frac{106.8}{117.71} + \ln \frac{106.8}{117.71} \right) =$$

$$= 1.031$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Los errores son del orden del 2% para el n-heptano y del orden del 1% para el tolueno.

Resumiendo, las condiciones prácticas de operación de la correlación C-S modificada por G-S son: temperaturas en el rango de 0 a 800 °F (-17 a 427 °C) y presiones menores de 3000 psi (200 atm). Esta correlación se emplea muy a menudo para simular unidades de destilación de crudo a presión atmosférica y unidades de reforming.

No se recomienda emplear C-S o G-S para calcular constantes K de componentes de punto de ebullición cercanos entre sí puesto que estos modelos a menudo sobreestiman las volatilidades relativas y la facilidad de separación.

VII.4.2 Ecuaciones que describen coeficientes de actividad de la fase líquida

La ecuación básica que ha desarrollado la termodinámica para relacionar entre sí los coeficientes de actividad es la de Gibbs y Duhem. Es en esencia una ecuación diferencial que establece la relación entre los coeficientes de actividad de las especies componentes de una mezcla. Por ejemplo para una mezcla binaria la ecuación de Gibbs y Duhem se puede escribir:

$$x_1 \left(\frac{\partial \ln \gamma_1}{\partial x_1} \right)_{P,T} = x_2 \left(\frac{\partial \ln \gamma_2}{\partial x_2} \right)_{P,T} \qquad \textbf{(29)}$$

Esta ecuación tiene varias aplicaciones importantes que resumimos a continuación. Supongamos tener una mezcla binaria para simplificar; entonces a partir de la ecuación (29) podemos:

a) Si tenemos datos experimentales para γ_1 en función de x_1 estamos en condiciones de integrar la ecuación (29) para calcular γ_2 en función de x_2 . En una mezcla binaria el coeficiente de actividad de un componente se puede usar para calcular el coeficiente de actividad del otro componente.

b) Si disponemos de abundantes datos experimentales tanto para γ_1 en función de x_1 como para γ_2 en función de x_2 estamos en condiciones de comprobar la exactitud y consistencia de los datos, puesto que debe cumplir la ecuación (29).

c) Si contamos sólo con una limitada cantidad de datos experimentales para γ_1 en función de x_1 y para γ_2 en función de x_2 , la forma integrada de la ecuación de Gibbs y Duhem nos permite obtener ecuaciones termodinámicamente consistentes para relacionar γ_1 y γ_2 con x_1 y x_2. Esta es la aplicación más importante ya que en la práctica rara vez contamos con suficiente cantidad de datos, si es que contamos con alguno. Sin embargo, no hay una sola forma integrada de la ecuación de Gibbs y Duhem sino varias

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

posibles. Para obtener una forma en particular se debe usar un modelo de ecuación consistente con la ecuación de Gibbs y Duhem.

Un enfoque derivado de la ecuación de Gibbs y Duhem nos permite evaluar la discrepancia de energía libre total de Gibbs de la mezcla en función de su composición. Se pueden deducir las siguientes ecuaciones para una mezcla binaria.

$$RT \ln \gamma_1 = \left(\frac{\partial G^E}{\partial n_1} \right)_{P,T,n_2} \quad \textbf{(30)}$$

$$RT \ln \gamma_2 = \left(\frac{\partial G^E}{\partial n_2} \right)_{P,T,n_1} \quad \textbf{(31)}$$

Para poder usar estas ecuaciones debemos poder representar G en función de la composición. Si podemos encontrar la función matemática que describe la discrepancia de energía libre de Gibbs con la concentración, estaremos en condiciones de extrapolar los datos experimentales de actividad de cada componente en función de la composición. Se pueden proponer varias ecuaciones que cumplan los requisitos de consistencia exigidos para representar estos sistemas, entre las que podemos citar a las de Margules, Van Laar, Wilson y NRTL.

VII.4.3. Ecuación de Margules

Se conoce con este nombre a un grupo de ecuaciones enunciadas por primera vez en 1895 por Margules. Existen varias ecuaciones, llamadas de "sufijo doble", "sufijo triple" y "sufijo cuádruple". Las expresiones "sufijo doble", "sufijo triple" o "sufijo cuádruple" se refieren a que la ecuación que describe la discrepancia de energía libre es cuadrática, cúbica o cuártica en la variable fracción molar en cada caso.

La ecuación de Margules más usada es la de sufijo triple (dos constantes). Tiene la siguiente forma.

$$\ln \gamma_1 = A x_2^2 + B x_2^3 \quad \textbf{(32)}$$

$$\ln \gamma_2 = A x_1^2 + 1.5 B x_1^2 - B x_1^3 \quad \textbf{(33)}$$

El principal atractivo de la ecuación de Margules es su sencillez algebraica si se la compara con otras ecuaciones. Pero esta no debe ser la razón de su elección

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

como modelo, ya que existen razones que aconsejan usar otras ecuaciones en ciertos casos. Por ejemplo, Margules no puede representar sistemas en los que la fase líquida se separa en dos capas inmiscibles.

La expresión que permite calcular la discrepancia de energía libre de Gibbs es la siguiente:

$$\frac{G^E}{RT} = x_1 \, x_2 \, (P + Q(x_1 - x_2)) \qquad \textbf{(34)}$$

Los parámetros P y Q son distintos de A y B, existiendo la siguiente relación entre ellos: A = P + 3Q; B = -4Q.

VII.4.4 Ecuación de Van Laar

La ecuación de Van Laar es muy usada debido a su flexibilidad, simplicidad y capacidad de representar bien muchos sistemas. Para un sistema binario se puede escribir de la siguiente forma:

$$\ln \gamma_1 = A_{12} \left(1 + \frac{A_{12} \, x_1}{A_{21} \, x_2} \right)^{-2} \quad ; \quad \ln \gamma_2 = A_{21} \left(1 + \frac{A_{21} \, x_2}{A_{12} \, x_1} \right)^{-2} \qquad \textbf{(35)}$$

También se la puede encontrar de esta forma alternativa:

$$\ln \gamma_1 = \frac{A'_{12}}{T} \left(1 + \frac{A_{12} \, x_1}{A_{21} \, x_2} \right)^{-2} \quad ; \quad \ln \gamma_2 = \frac{A'_{12} \, A'_{21}}{T} \left(1 + \frac{A_{21} \, x_2}{A_{12} \, x_1} \right)^{-2} \qquad \textbf{(36)}$$

La teoría de Van Laar expresa la dependencia de los parámetros de interacción binarios de la siguiente manera:

$$A_{ij} = \frac{A'_{ij}}{RT}$$

La expresión que permite calcular la discrepancia de energía libre de Gibbs es la siguiente:

$$\frac{G^E}{RT} = \frac{C \, x_1 \, x_2}{x_1 \, (C/D) + x_2} \qquad \textbf{(37)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como anteriormente, los parámetros C y D son propios de la ecuación (37). Los parámetros de interacción A_{12} y A_{21} son (en teoría) constantes para un par determinado de componentes binarios a una cierta temperatura, pero en la práctica también dependen de la temperatura por lo que la forma (37) no es tan habitual, y se calculan frecuentemente a partir de datos isobáricos que cubren un rango de temperaturas. La ecuación de Van Laar puede representar sistemas con desviaciones tanto positivas como negativas de la ley de Raoult, pero no puede representar exactamente curvas que tengan un máximo como la del sistema cloroformo-metanol.

Para sistemas multicomponentes es costumbre despreciar los parámetros de interacción terciarios y superiores lo que equivale a suponer que el sistema se comporta como un sistema pseudo binario. La expresión de Van Laar que resulta para los coeficientes de actividad depende solo de la composición y de las constantes binarias. La siguiente forma suele ser muy usada.

$$\ln \gamma_1 = \sum_{j=1}^{NC} \frac{x_j\, A_{ij}}{1 - x_j} \left(1 - \left[\frac{x_j \sum_{j=1}^{NC} \left[\frac{(x_j\, A_{ij})}{(1 - x_j)} \right]}{x_j \sum_{j=1}^{NC} \frac{x_j\, A_{ij}}{(1 - x_j)} + (1 - x_j) \sum_{j=1}^{NC} x_j\, A_{ji}} \right]^2 \right) \qquad \textbf{(38)}$$

En la ecuación anterior $A_{ii} = A_{jj} = 0$. Para una mezcla multicomponente de N sustancias se pueden formar N(N-1)/2 pares de binarios. Por ejemplo si N = 5 existen 10 pares de binarios. Esta ecuación está restringida a los casos en que todos los pares de parámetros de interacción binaria A_{ij} y A_{ji} sean del mismo signo. Si no ocurre esto, y/o si todos los valores de A_{ij} son grandes pero aun existe miscibilidad completa, se puede emplear una forma modificada de la anterior bastante más compleja. Existen en la bibliografía especializada extensas tablas de coeficientes de interacción binaria (Perry, 6ta. ed.).

Cuando todos los valores absolutos de todos los coeficientes del sistema son menores que 0.01, el coeficiente de actividad de los integrantes de la mezcla en la fase líquida tiene valores en el entorno 1.00 ± 0.01 y entonces es posible asumir comportamiento ideal. Si no es posible encontrar los coeficientes de interacción binaria de todas las especies presentes en la mezcla se recomienda seguir el siguiente procedimiento:

1) Para isómeros y pares de sustancias homólogas de puntos de ebullición cercanos se supone que pueden formar soluciones ideales, asuma $A_{ii} = A_{jj} = 0$.
2) Para pares de hidrocarburos que se sabe que siguen un comportamiento conforme a la teoría de soluciones regulares, se puede usar la ecuación (38)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

para estimar A_{ij} y A_{ji}.

3) Para pares que contienen especies polares u otras que no tienen un comportamiento conforme a la teoría de soluciones regulares se pueden determinar las constantes de Van Laar a partir de coeficientes de actividad calculados de datos experimentales.
4) Cuando existen datos suficientes de pares estrechamente relacionados, se puede interpolar y extrapolar.
5) Si no existen datos, se puede seguir un procedimiento basado en la estimación de coeficientes a dilución infinita.

Cuando los datos se obtienen en forma isotérmica o isobárica en un margen de temperaturas estrecho, se pueden determinar las constantes de la ecuación de Van Laar de un modo más simple, normalmente por regresión lineal. Este procedimiento, como sabemos, consiste en obtener la ecuación de la recta que mejor ajusta los datos por medio de la técnica de mínimos cuadrados. También se pueden aplicar otras técnicas basadas en el concepto de mínimos cuadrados generalizados para obtener las constantes de Van Laar cuando el intervalo de temperaturas no es estrecho o los datos no son isotérmicos, pero el procedimiento no es tan exacto y el cálculo de coeficientes de actividad se complica.

Cuando los datos experimentales se pueden extrapolar a dilución infinita es posible utilizar un procedimiento más rápido pero menos exacto de cálculo. Vamos a dar un esbozo de procedimiento para estos casos. Aplicando las ecuaciones (35) para $x_1 = 0$ en la ecuación izquierda y para $x_2 = 0$ en la derecha tenemos:

$$\ln \gamma_1^{\infty} = A_{12}\left(1 + \frac{A_{12}\, x_1}{A_{21}\, x_2}\right)^{-2} = A_{12} \Rightarrow A_{12} = \ln \gamma_1^{\infty} \qquad \textbf{(39)}$$

$$\ln \gamma_2^{\infty} = A_{21}\left(1 + \frac{A_{21}\, x_2}{A_{12}\, x_1}\right)^{-2} = A_{21} \Rightarrow A_{21} = \ln \gamma_2^{\infty} \qquad \textbf{(40)}$$

Para aplicaciones prácticas en las que están implicados azeótropos es importante que la ecuación de Van Laar sea capaz de predecir correctamente la formación del azeótropo. Si se conocen o se pueden calcular los coeficientes de actividad en la composición del azeótropo entonces se pueden resolver las ecuaciones (35). Digamos por ejemplo que se estima el coeficiente de actividad en el azeótropo de la siguiente ecuación:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$K_i = \frac{\gamma_i^{\circ L} \; P_i^s}{P} = 1.0 \Rightarrow \gamma_i^{\circ L} = \frac{P}{P_i^s}$$

Entonces resolviendo las ecuaciones (35) obtenemos:

$$A_{12} = \ln \gamma_i \left(1 + \frac{x_2 \ln\gamma_2}{x_i \ln\gamma_1} \right)^2 \quad ; \quad A_{21} = \ln \gamma_2 \left(1 + \frac{x_1 \ln\gamma_1}{x_2 \ln\gamma_2} \right)^2$$

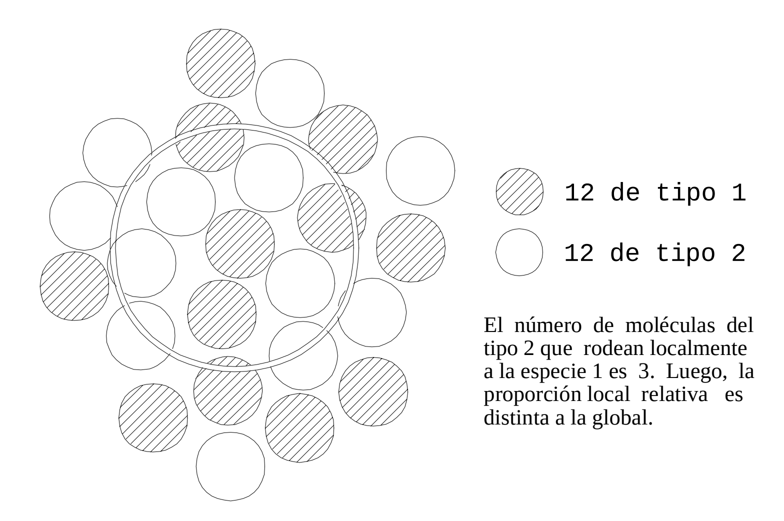
VII.4.5 Ecuación de Wilson

Las mezclas de moléculas polares auto asociadas (Clase II) con moléculas no polares tales como hidrocarburos (Clase V) pueden exhibir una fuerte no idealidad del tipo desviación positiva (por ejemplo la mezcla etanol + n-heptano). En la mayoría de las mezclas de este tipo la ecuación de Van Laar funciona muy bien en un entorno de x = 0.1 a 0.9. Fuera de éste la exactitud se deteriora bastante y los coeficientes de actividad para el etanol son bajos.

Un problema más serio aún es que con estas mezclas altamente no ideales la ecuación de Van Laar puede predecir erróneamente la separación de la mezcla en dos fases. Para tratar con esta clase de mezclas, en 1964 Wilson propuso la ecuación que lleva su nombre y que ha recibido gran aceptación debido a su capacidad de manejar sistemas miscibles fuertemente no ideales. En la ecuación de Wilson se toman en cuenta los efectos de las diferencias de tamaño y fuerzas de atracción de las moléculas de las distintas especies mediante un tratamiento basado en el concepto de composición local. Este difiere radicalmente del concepto clásico de composición global en un aspecto clave. Para el concepto clásico la composición de la mezcla es uniforme puesto que las especies se difunden mutuamente hasta alcanzar una distribución al azar. Nótese que no se hace ninguna distinción entre las moléculas, a pesar de que sabemos que por la naturaleza direccional de muchos enlaces agregativos las mismas se pueden encontrar agrupadas en forma asimétrica.

Por ejemplo, supongamos tener una mezcla equimolecular de dos especies químicas que identificamos como 1 y 2. La fracción molar global de cada especie química es 0.5. Sin embargo tomando un sector determinado de la mezcla podemos observar que las moléculas tienden a agruparse del modo que se ilustra en la Figura siguiente (ver Cukor y Prausnitz, 1969).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



Analizando la zona interior al círculo observamos que las moléculas de la clase 1 (rayadas) están en minoría, de modo que la composición local en esta zona es distinta a la global, a pesar de que la muestra considerada contiene igual cantidad de moléculas de ambas clases. La fracción de volumen local propuesta por Wilson es función de la temperatura y de las energías de interacción, como se observa en la ecuación siguiente.

$$\overline{\Phi}_i = \frac{v_i^L \; x_i \; \exp(-\lambda_{ii}/(RT))}{\sum_{j=1}^{NC} v_j^L \; x_j \; \exp(-\lambda_{ij}/(RT))} \qquad \textbf{(41)}$$

donde λ representa las energías de interacción, siendo $\lambda_{ij} = \lambda_{ji}$ pero $\lambda_{ii} \neq \lambda_{jj}$.

Utilizando estos parámetros para el cálculo de las constantes de interacción binarias $\wedge_{12}$ y $\wedge_{21}$ obtenemos:

$$\Lambda_{12} = \frac{v_2^L}{v_1^L} \exp\left[-\frac{\lambda_{12} - \lambda_{11}}{RT}\right] \qquad \textbf{(42)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\Lambda_{21} = \frac{v_1^L}{v_2^L} \exp\left[- \frac{\lambda_{21} - \lambda_{22}}{RT} \right] \qquad \textbf{(43)}$$

De tal modo, la discrepancia de energía libre molar de Gibbs se puede expresar:

$$\frac{G^E}{RT} = - x_1 \ln (x_1 + \Lambda_{12} x_2) - x_2 \ln (x_2 + \Lambda_{21} x_1) \qquad \textbf{(44)}$$

En base a esta ecuación y del modo acostumbrado se obtiene la ecuación de Wilson para los coeficientes de actividad de los componentes de una mezcla en la fase líquida. Para una mezcla binaria:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) + x_2 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + \Lambda_{21} x_1} \right] \qquad \textbf{(45)}$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) - x_1 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12} x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + \Lambda_{21} x_1} \right] \qquad \textbf{(46)}$$

De modo similar a la ecuación de Van Laar, la ecuación de Wilson se puede extender a sistemas multicomponentes obteniendo:

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left[\sum_{j=1}^{NC} x_j \Lambda_{ij} \right] - \sum_{k=1}^{NC} \left[\frac{x_k \Lambda_{ki}}{\sum_{j=1}^{NC} x_j \Lambda_{kj}} \right] \qquad \textbf{(47)}$$

donde:

$$\Delta_{ii} = \Delta_{jj} = \Delta_{kk} = 1 \; ; \qquad \Delta_{ij} = \left(\frac{\upsilon_j}{\upsilon_i} \right) \exp \left[\frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ii}}{R\ T} \right]$$

Cuando no existen suficientes datos para determinar los parámetros binarios de la ecuación de Wilson de una curva o tabla de coeficientes que cubra todo el rango

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de composiciones, se pueden usar coeficientes a dilución infinita. En este caso, la ecuación de Wilson se transforma del siguiente modo.

$$\ln \gamma_1^\infty = 1 - \ln \Lambda_{12} - \Lambda_{21} \quad \textbf{(48)}$$

$$\ln \gamma_2^\infty = 1 - \ln \Lambda_{21} - \Lambda_{12} \quad \textbf{(49)}$$

Se requiere un procedimiento iterativo para obtener Λ_{12} y Λ_{21}. Si las temperaturas correspondientes a γ_1^∞ y γ_2^∞ no son cercanas o iguales, se deben usar las ecuaciones (42) y (43) para tomar en cuenta el efecto de la misma, con valores de (λ_{12} - λ_{11}) y (λ_{12} - λ_{22}) determinados a partir de estimaciones de volúmenes molares de componentes puros de mezclas líquidas. Este procedimiento es más engorroso e igual de inexacto que los basados en métodos de contribución de grupos.

VII.4.6 Ecuación NRTL

La principal limitación de los métodos que evalúan el coeficiente de actividad en la fase líquida era hasta la aparición de la ecuación NRTL su incapacidad para manejar los sistemas en los que la fase líquida estaba compuesta por dos líquidos inmiscibles. Sin embargo, estos sistemas aparecen con cierta frecuencia en la práctica. En una actualización de su conocida ecuación, Wilson agrega un tercer parámetro para poder manejar estos sistemas, pero la ecuación que resulta no se presta fácilmente para manejar sistemas multicomponentes. Además, esta ecuación da resultados bastante insatisfactorios, lo que impulsó la investigación y profundización de la teoría con el objetivo de poder disponer de una herramienta capaz de manejar sistemas en los que el líquido está dividido en dos fases.

La ecuación NRTL es el primer modelo capaz de manejarlos. Consiste en una extensión del concepto de Wilson aplicable a sistemas multicomponentes del tipo vapor-líquido, líquido-líquido, y vapor-líquido-líquido. Al requerir solo constantes de pares binarios, retiene la simplicidad que constituye el principal atractivo de los modelos que hemos visto hasta ahora.

La denominación NRTL es una sigla de -Non Random Two Liquid-, y trata de expresar el hecho de que se basa en un parámetro α_{ij} que caracteriza la tendencia de las especies i y j a distribuirse de una manera no azarosa, esto es, con direcciones preferenciales. La diferencia básica entre el sustento de la ecuación de Wilson y la NRTL reside en que la primera se basa en una fracción de volumen para expresar la concentración local mientras la ecuación NRTL se basa en una fracción molar de la especie considerada. Esta se expresa:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$x_{ji} = \frac{x_j \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji})}{\sum_{k=1}^{NC} x_k \exp(-\alpha_{ki} \tau_{ki})} \qquad \textbf{(50)}$$

Comparemos esta relación con la ecuación que expresaba la fracción local de volumen en la ecuación de Wilson, y con la ecuación que expresaba la fracción de volumen en la teoría de soluciones regulares. Cuando α_{ji} = 0 las fracciones molares locales son iguales a las fracciones molares verdaderas de la mezcla. En esta ecuación para el par binario i-j donde se supone que la molécula i ocupa el centro de un retículo tridimensional, los parámetros α_{ji} y τ_{ji} son ajustables. Esto tiene una gran significación práctica porque si contamos con abundantes datos experimentales de la mezcla que queremos representar, los parámetros α y τ se pueden modificar mediante un tratamiento matemático adecuado, y la ecuación NRTL se ajusta a los datos disponibles mucho más exactamente que las otras.

La discrepancia de energía libre de Gibbs para el sistema líquido se representa en términos de las interacciones mutuas entre dos moléculas. La expresión que resulta es la siguiente.

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{i=1}^{NC} x_i \left[\sum_{j=1}^{NC} x_{ji} \tau_{ji} \right] \qquad \textbf{(51)}$$

La expresión que permite calcular los coeficientes de actividad para la fase líquida se obtiene combinando las dos ecuaciones anteriores obteniendo la siguiente expresión para mezclas multicomponentes:

$$\ln \gamma_i^L = \frac{\sum_{j=1}^{NC} \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{k=1}^{NC} G_{ki} x_k} + \sum_{j=1}^{NC} \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{k=1}^{NC} G_{kj} x_k} \left[\tau_{ij} - \frac{\sum_{k=1}^{NC} \tau_{kj} G_{kj} x_k}{\sum_{k=1}^{NC} G_{kj} x_k} \right] \qquad \textbf{(52)}$$

donde:

$$G_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} \tau_{ji})$$

Los coeficientes τ vienen dados por las siguientes expresiones.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\tau_{ij} = \frac{g_{ij} - g_{jj}}{RT}$$

$$\tau_{ji} = \frac{g_{ji} - g_{ii}}{RT}$$

donde g_{ij}, g_{jj}, etc son las energías libres molares de Gibbs de interacción entre pares de moléculas. En las ecuaciones anteriores se debe considerar $G_{ji} \neq G_{ij}$, $\tau_{ij} \neq \tau_{ji}$, $G_{ii} = G_{jj} = 1$, $\tau_{ii} = \tau_{jj} = 0$.

En la literatura se encuentran publicadas listas de valores de constantes de la ecuación NRTL. A menudo las diferencias de energías libres de interacción y otras constantes en la ecuación anterior varían linealmente con la temperatura, lo que es una suerte porque simplifica mucho los cálculos. En general el parámetro α_{ij} resulta independiente de la temperatura y depende de las propiedades moleculares. Su valor suele estar entre 0.2 y 0.47.

Cuando es menor de 0.426 es razonable suponer que habrá inmiscibilidad de fases. Aunque α_{ij} se puede considerar un parámetro ajustable, más frecuentemente se fija de acuerdo a las siguiente reglas, aun cuando estas pueden ser ambiguas ocasionalmente.

1) $\alpha_{ij} = 0.2$ para mezclas de hidrocarburos saturados y especies polares no asociadas (por ejemplo, acetona + n-heptano).
2) $\alpha_{ij} = 0.3$ para mezclas de compuestos no polares (por ejemplo n-heptano + benceno), excepto hidrocarburos fluorados y parafinas; mezclas de especies no polares y polares no asociadas que tienen desviaciones negativas de la ley de Raoult (por ejemplo, acetona+cloroformo) y desviaciones moderadamente positivas (por ejemplo, etanol+agua); mezclas de agua y sustancias polares no asociadas (por ejemplo, agua+acetona).
3) $\alpha_{ij} = 0.4$ para mezclas de hidrocarburos saturados y de hidrocarburos perfluorados homólogos (por ejemplo, n-hexano+perfluoro-n-hexano).
4) $\alpha_{ij} = 0.47$ para mezclas de un alcohol u otra sustancia fuertemente auto asociada y una especie no polar (por ejemplo, etanol+benceno); mezclas de tetracloruro de carbono con acetonitrilo o trinitrometano; mezclas de agua con piridina o butil-glicol.

Si damos valor a α_{ij} de acuerdo a estas reglas en lugar de considerarlo un parámetro ajustable, la pérdida de exactitud es comparativamente pequeña. Esto

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

significa menos trabajo cuando el cálculo es manual, pero no representa mucha diferencia cuando es computacional salvo en los casos en que necesitamos reducir en extremo el tiempo de cálculo, por ejemplo en simulación en tiempo real, como veremos en el Capítulo XXI. En estos casos se recurre a modelos fisicoquímicos lo más exactos y simplificados posibles.

Para un sistema binario, la expresión anterior se reduce a las siguientes ecuaciones.

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 \left[\frac{\tau_{21} G_{21}^2}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} + \frac{\tau_{12} G_{12}}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} \right] \qquad \textbf{(53)}$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left[\frac{\tau_{12} G_{12}^2}{(x_2 + x_1 G_{12})^2} + \frac{\tau_{21} G_{21}}{(x_1 + x_2 G_{21})^2} \right] \qquad \textbf{(54)}$$

Para mezclas ideales $\tau_{ij} = 0$. Como hemos explicado en el caso de la ecuación de Wilson, los dos parámetros que involucran cambios de energía de la ecuación NRTL se pueden obtener a partir de coeficientes de actividad a dilución infinita si se fija el valor de α mediante las reglas anteriores. A dilución infinita las ecuaciones correspondientes son:

$$\ln \gamma_1^{\infty} = \tau_{21} + \tau_{12} \exp(-\alpha_{12} \tau_{12})$$

$$\ln \gamma_2^{\infty} = \tau_{12} + \tau_{21} \exp(-\alpha_{12} \tau_{21})$$

Ejemplo (Tomado de Reid y col.)

Obtener los coeficientes de actividad para la mezcla binaria etanol + n-hexano a la composición del azeótropo, partiendo de los coeficientes de actividad a dilución infinita siguientes: $\gamma_e^{\infty} = 21.72$, $\gamma_h^{\infty} = 9.104$. Despreciando los efectos de la temperatura, use estos valores para determinar τ_{he} y τ_{eh}. Luego, obtenga los coeficientes de actividad a la composición del azeótropo: $x_e = 0.332$, $x_h = 0.668$ y compare estos valores con los experimentales: $\gamma_e = 2.348$ y $\gamma_h = 1.430$.

Solución

De acuerdo a las reglas que hemos expuesto previamente se fija $\alpha_{eh} = 0.47$. Los valores de τ_{he} y τ_{eh} se obtienen resolviendo el siguiente sistema de ecuaciones no lineales.

$\ln 21.72 = \tau_{he} + \tau_{eh} \exp(-0.47\, \tau_{eh})$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$\ln 9.104 = \tau_{eh} + \tau_{he} \exp(-0.47\ \tau_{he})$

Resolvemos el sistema por el método de aproximaciones sucesivas y obtenemos: $\tau_{he} = 2.3480$, $\tau_{eh} = 1.4299$. Calculamos los parámetros G:

$G_{he} = \exp(-0.47\ \tau_{he}) = 0.5106$ $\qquad G_{eh} = \exp(-0.47\ \tau_{eh}) = 0.3317$

Finalmente obtenemos:

$$\gamma_e = \exp\left(0.668^2\left[\frac{1.4299(0.5106^2)}{(0.332+0.668(0.5106))^2} + \frac{2.438(0.3317)}{(0.668+0.332(0.3317))^2}\right]\right) =$$

$$= 2.563$$

$$\gamma_h = \exp\left(0.332^2\left[\frac{2.348(0.3317^2)}{(0.668+0.332(0.3317))^2} + \frac{1.4299(0.5106)}{(0.332+0.668(0.5106))^2}\right]\right) = 1.252$$

Estos valores están 9.2% en exceso y 12.4% en defecto con respecto a los experimentales, y si se compara el error de la ecuación NRTL con el de la ecuación de Wilson para el mismo ejemplo se observa que es mayor. Sin embargo, las mezclas de alcoholes e hidrocarburos son los únicos sistemas en los que la ecuación de Wilson da mejores resultados que la NRTL, porque en todos los otros sistemas los resultados de la NRTL son igualmente exactos o mejores que los de la ecuación de Wilson.

VII.4.7 Ecuación UNIQUAC

El principal atractivo de la ecuación de Wilson es su relativa simplicidad. En la ecuación NRTL existen tres parámetros ajustables mientras la ecuación de Wilson tiene solo dos. La ecuación UNIQUAC es un intento por hallar un modelo que combine las ventajas de la ecuación NRTL con la simplicidad de la de Wilson, y al mismo tiempo proveer una base teórica más sólida a los cálculos para sistemas multicomponentes. Además, la ecuación UNIQUAC se puede aplicar a sistemas líquido-líquido.

UNIQUAC es una sigla que simboliza -Universal Quasi-Chemical- lo que podría tomarse como "universal casi-química" en una alusión a la teoría química de las imperfecciones. Este modelo apunta a representar moléculas que difieren apreciablemente en tamaño y forma, a la vez que toma en cuenta los efectos de las diferencias de polaridad. Se retiene el concepto de concentraciones locales empleado en los modelos de Wilson y NRTL, pero en vez de usar una fracción local de volumen

o una fracción molar local la ecuación UNIQUAC usa la fracción local de área θ_{ij} como variable primaria de concentración.

Esta fracción local de área se determina representando cada molécula por medio de un juego de segmentos ligados entre sí como si fuese un modelo espacial de la molécula. Cada molécula se caracteriza por dos parámetros estructurales que se determinan con relación a un segmento standard o de referencia, tomado como una esfera equivalente a una unidad o monómero de una molécula lineal de polimetileno de longitud infinita. Esto equivale a decir que se compara cada molécula con una unidad standard, la que cumple la misma función que un "metro patrón". Los dos parámetros estructurales que se usan para caracterizar cada molécula son el número relativo de segmentos por molécula r (parámetro de volumen), y la superficie relativa de la molécula q (parámetro de superficie). Estos parámetros se miden a través de los ángulos de las uniones químicas y sus longitudes medias y se encuentran listas de ambos en la literatura. También se pueden calcular por medio de un método de contribuciones de grupo.

Para una mezcla líquida de multicomponentes, el modelo UNIQUAC permite calcular la discrepancia de energía libre de Gibbs de la siguiente manera.

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{i=1}^{NC} x_i \ln\left(\frac{\Psi_i}{x_i}\right) + \frac{\overline{Z}}{2} \sum_{i=1}^{NC} q_i \, x_i \ln\left(\frac{\theta_i}{\Psi_i}\right) - \sum_{i=1}^{NC} q_i \, x_i \ln\left(\sum_{j=1}^{NC} \theta_j \, T_{ji}\right) \quad \textbf{(55)}$$

Los primeros dos términos a la derecha del signo igual toman en cuenta los efectos combinatorios debido a las diferencias de tamaño y forma entre moléculas. El último término es la contribución residual entre moléculas debido a diferencias en fuerzas intermoleculares. Las otras variables tienen el siguiente significado.

$$\Psi_i = \frac{x_i \, r_i}{\sum_{i=1}^{NC} x_i \, r_i} = \textit{fracción de segmento}$$

$$\theta_i = \frac{x_i \, q_i}{\sum_{i=1}^{NC} x_i \, q_i} = \textit{fracción de área}$$

$\overline{Z}$ = número de coordinación de retículo = 10

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$T_{ji} = \exp\left(- \frac{u_{ji} - u_{ii}}{RT} \right)$$

La ecuación UNIQUAC que permite calcular la discrepancia de energía libre sólo tiene dos parámetros ajustables para cada par binario, que son $(u_{ji} - u_{ii})$ y $(u_{ji} - u_{jj})$. Se deberá tomar $u_{ji} = u_{ij}$ y $T_{ii} = T_{jj} = 1$. En general tanto $(u_{ji} - u_{ii})$ como $(u_{uj} - u_{jj})$ son funciones lineales de la temperatura.

La ecuación UNIQUAC que permite calcular los coeficientes de actividad de una especie en una mezcla de multicomponentes es la siguiente.

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \qquad \textbf{(56)}$$

donde $\ln \gamma_i^C$ representa la componente combinatoria y $\ln \gamma_i^R$ representa la componente residual. Cada uno de estas componentes se puede calcular de la siguiente manera:

$$\ln \gamma_i^C = \ln\left(\frac{\Psi_i}{x_i} \right) + \frac{\overline{Z}}{2} q_i \ln\left(\frac{\theta_i}{\Psi_i} \right) + \ell_i - \frac{\Psi_i}{x_i} \sum_{j=1}^{NC} \ell_j x_j \qquad \textbf{(57)}$$

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln\left(\sum_{j=1}^{NC} \theta_j T_{ji} \right) - \sum_{j=1}^{NC} \left(\frac{\theta_j T_{ij}}{\sum_{k=1}^{NC} \theta_k T_{kj}} \right) \right] \qquad \textbf{(58)}$$

donde: $\ell_j = \frac{\overline{Z}}{2} (r_j - q_j) - (r_j - 1)$.

Para una mezcla binaria de dos especies 1 y 2 la ecuación anterior se reduce al siguiente sistema de dos ecuaciones.

$$\ln \gamma_1 = \ln\left(\frac{\Psi_1}{x_1} \right) + \frac{\overline{Z}}{2} q_1 \ln\left(\frac{\theta_1}{\Psi_1} \right) + \Psi_2\left(\ell_1 - \frac{r_1}{r_2} \ell_2 \right) - q_1 \ln(\theta_1 + \theta_2 T_{21}) +$$

$$+\theta_2 q_1 \left(\frac{T_{21}}{\theta_1 + \theta_2 T_{21}} - \frac{T_{12}}{\theta_2 + \theta_1 T_{12}} \right)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\ln \gamma_2 = \ln\left(\frac{\Psi_2}{x_2}\right) + \frac{\overline{Z}}{2} q_2 \ln\left(\frac{\theta_2}{\Psi_2}\right) + \Psi_1\left(\ell_2 - \frac{r_2}{r_1}\ell_1\right) - q_2 \ln(\theta_2 + \theta_1 T_{12}) +$$

$$+\theta_1 q_2\left(\frac{T_{12}}{\theta_2 + \theta_1 T_{12}} - \frac{T_{21}}{\theta_1 + \theta_2 T_{21}}\right)$$

Es interesante observar que la ecuación UNIQUAC es una ecuación general, es decir que describe a las otras ecuaciones, que se convierten así en casos especiales de la ecuación UNIQUAC. Esto es una reafirmación de la solidez teórica del modelo y demuestra que es más confiable. Por ejemplo, si tomamos $q_i = r_i = 1$ la ecuación UNIQUAC para la especie 1 se escribe:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 T_{21}) + x_2\left(\frac{T_{21}}{x_1 + x_2 T_{21}} - \frac{T_{12}}{x_2 + x_1 T_{12}}\right)$$

Esta ecuación es idéntica a la que se obtiene a partir de la ecuación de Wilson haciendo $T_{21} = \Lambda_{12}$ y $T_{12} = \Lambda_{21}$. Se ha encontrado que la ecuación UNIQUAC es tan exacta como la de Wilson para sistemas líquido-vapor.

VII.4.8 El método UNIFAC

UNIFAC es uno dentro de un conjunto de métodos conocidos como métodos de contribución de grupos. Estos métodos surgieron como consecuencia de la necesidad de hacer estimaciones de propiedades termodinámicas en casos en los que no se cuenta con ningún dato experimental. La idea sustantiva de estos métodos es que una molécula se puede considerar como la suma de todos los grupos que la integran.

En consecuencia algunas propiedades termodinámicas de fluidos puros como el calor específico o el volumen crítico se podrían calcular sumando las contribuciones de cada uno de los grupos que integran la molécula, lo que implica asumir en primer lugar que la contribución de un grupo dado en una molécula es exactamente la misma que en otra molécula distinta, y en segundo lugar que dichas contribuciones son aditivas. Esto no es estrictamente cierto, ya que los grupos se pueden comportar de manera diferente según el tamaño de la molécula, la posición en la que se encuentran y la manera como interaccionan con los grupos adyacentes.

El problema que entonces se plantea se resuelve en algunos métodos corrigiendo esa contribución mediante factores de posición, complejidad, etc. La exactitud de un método de contribución de grupos se incrementa con la fineza de

detalle usada en la definición y distinción de los mismos. Por ejemplo si consideramos los alcoholes alifáticos, en una primera aproximación no se hace diferencias entre un alcohol primario o secundario; pero en una segunda aproximación es mejor hacerla porque aumenta la exactitud. En el caso extremo de máximo detalle en la definición de cada grupo, el grupo se hace igual a la molécula.

Esto por supuesto no es practicable porque desaparecería la ventaja principal del método, y tendríamos una cantidad gigantesca de grupos distintos listados. La solución de compromiso se obtiene fijando la especificidad de cada grupo en el mínimo compatible con una cantidad pequeña de grupos. La extensión de los métodos de contribución de grupos a las mezclas es sumamente atractiva porque aunque la cantidad de compuestos puros que se encuentra en la práctica industrial es sumamente grande, la cantidad de mezclas diferentes es muchas veces mayor dado que cada mezcla es una combinación de sustancias puras y la cantidad de combinaciones posibles es, como se sabe, un número grande que depende de la cantidad de sustancias de la mezcla. Existen millones de mezclas posibles con interés práctico industrial, y la obtención de datos experimentales para cada una de ellas siempre está atrasada con respecto a la industria.

Por otro lado, ese gran conjunto de mezclas está compuesto a lo sumo por un centenar de grupos, de modo que la generación de predicciones a partir de un método de contribución de grupos resuelve problemas que de otro modo tendrían que esperar a la obtención de valores experimentales confiables con la consiguiente pérdida de tiempo y dinero. Por este motivo el método UNIFAC se ha usado cada vez más en los últimos tiempos y se ha aplicado a la estimación de muchas propiedades termodinámicas de mezclas.

En el método UNIFAC el coeficiente de actividad se calcula según dos contribuciones: una debida a diferencias en el tamaño de la molécula y otra contribución debida a interacciones entre moléculas. Como vemos, se ha seguido el concepto básico de la ecuación UNIQUAC, en tanto se lo divide en una parte combinatoria y una residual. En el método UNIFAC la parte combinatoria se escribe:

$$r_i = \sum_{k=1}^{G} \nu_k^{(i)} R_k \qquad \textbf{(59)}$$

$$q_i = \sum_{k=1}^{G} \nu_k^{(i)} Q_k \qquad \textbf{(60)}$$

donde i representa a la molécula, G es la cantidad de grupos funcionales del tipo k en la molécula i, y R y Q representan los parámetros de volumen y área respectivamente, para el grupo funcional considerado. El término residual que se representa igual que

en la ecuación UNIQUAC como γ_i^R se calcula:

$$\ln \gamma_i^R = \sum_{k=1}^{G} \nu_k^{(i)} \left(\ln \Gamma_k \;\; \ln \Gamma_k^{(i)}\right) \qquad \textbf{(61)}$$

donde: Γ_k es el coeficiente de actividad residual del grupo funcional k en la molécula, y Γ_k^i es la misma cantidad pero en una mezcla de referencia que contiene solamente moléculas del tipo i. Por razones de coherencia con las ecuaciones básicas de la termodinámica se exige que γ_i^R tienda a 1 cuando x_i tiende a 1. Tanto Γ_k como Γ_k^i tienen la misma forma que en el término residual correspondiente de la ecuación UNIQUAC.

Entonces:

$$\ln \Gamma_k = Q_k \left[1 - \ln \left(\sum_{m=1}^{G} \theta_m T_{mk} \right) - \sum_{m=1}^{G} \frac{\theta_m T_{km}}{\sum_{n=1}^{G} \theta_n T_{nm}} \right] \qquad \textbf{(62)}$$

donde: θ_m es la fracción de área del grupo m, dado por la siguiente ecuación.

$$\theta_m = \frac{X_m Q_m}{\sum_{n=1}^{G} X_n Q_n} \qquad \textbf{(63)}$$

y X_m es la fracción molar del grupo m en la mezcla.

$$X_m = \frac{\sum_{j=1}^{G} \nu_m^{(j)} x_j}{\sum_{j=1}^{G} \sum_{m=1}^{G} \nu_m^{(j)} x_j} \qquad \textbf{(64)}$$

Por su parte, T_{mk} es un parámetro de interacción de grupo dado por una ecuación análoga a la correspondiente en la ecuación UNIQUAC.

$$T_{mk} = \exp\left(- \frac{a_{mk}}{T} \right) \qquad \textbf{(65)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde $a_{mk} \neq a_{km}$. Cuando m = k es $a_{mk} = 0$ y $T_{mk} = 1$.

Esto puede parecer un poco pesado, y de hecho lo es. La práctica del método UNIFAC está reducida casi exclusivamente al uso de computadoras porque aplicarlo a mano puede resultar bastante denso. Se encuentran publicadas en la literatura (ver por ejemplo referencia (Reid, Prausnitz y Poling)) tablas muy extensas y completas listando valores de R_k , Q_k , a_{mk} y a_{km}. Estas se actualizan permanentemente.

El método UNIFAC es probablemente la herramienta de cálculo más poderosa con que cuenta el ingeniero especializado en problemas de modelado de sistemas multicomponentes. Sin embargo, no es la panacea que cura todos los males. Tiene limitaciones que traban su exactitud y versatilidad. Por lo tanto se debe tener cuidado de no sobrepasar esas limitaciones. Por ejemplo, se debe contemplar que:

- La cantidad de grupos funcionales debe ser menor de 10.
- La presión de la mezcla debe ser menor de 3-4 ata, a menos que se utilice una corrección para la no idealidad de la fase vapor.
- La temperatura de la mezcla no debe ser menor de 80 ni mayor de 300 °F (27 a 152 °C).
- Los componentes deben estar bien por debajo de sus puntos críticos.
- Los parámetros de interacción se suponen en la técnica UNIFAC independientes de la temperatura; no obstante eso tiene poco sustento teórico, y puede ser causa de error.
- UNIFAC no puede manejar sistemas inmiscibles. Esta es una seria limitación.
- UNIFAC no puede manejar sistemas en los que hay presentes incondensables.
- UNIFAC no puede representar el comportamiento de los polímeros (aunque se están reportando aplicaciones recientemente en este campo) ni de los electrolitos.
- UNIFAC da errores muy superiores al promedio cuando se utiliza a bajas concentraciones.

El efecto de las altas presiones sobre la fase líquida no es importante; dado que los líquidos son casi incompresibles, el efecto del aumento de presión sobre el coeficiente de actividad de la fase líquida se puede despreciar. El efecto sobre la fase vapor en cambio es muy marcado. Cuando la presión sube por encima de unas 5-6 ata el comportamiento de la fase vapor deja de ser ideal, por lo que el método UNIFAC no se recomienda para calcular el coeficiente de fugacidad. No obstante, se pueden usar varios de los modelos que ya han sido examinados anteriormente: ecuaciones de estado (S-R-K, P-R, L-K).

Para los casos de inmiscibilidad parcial o total un esquema similar se puede emplear en concurrencia con las ecuaciones NRTL o UNIQUAC, que pueden manejar inmiscibilidad. El procedimiento a seguir requiere contar con datos de equilibrio líquido-líquido para poder obtener los parámetros de la ecuación NRTL o UNIQUAC

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

por regresión, y usar UNIFAC para calcular los datos faltantes.

Si bien en los párrafos anteriores mencionamos algunos procedimientos para salvar situaciones de aplicabilidad del método, existen algunas limitaciones que no podemos superar fácilmente, o hacen inviable hasta hoy, el uso del método UNIFAC; por ejemplo la limitación en la cantidad de grupos funcionales presentes, la temperatura de la mezcla, la exigencia de la lejanía (bien por debajo) de los puntos críticos, la dificultad para representar el comportamiento de los polímeros o de los electrolitos, y por último, la existencia de errores considerables cuando se lo utiliza a bajas concentraciones.

A pesar de las limitaciones que hemos expuesto, UNIFAC es una herramienta excelente cuando ninguna ecuación es aplicable y tampoco se cuenta con datos experimentales que pueden usarse como base. Esto no quiere decir que se use UNIFAC en cualquier caso. Quiere decir exactamente lo que se dice: UNIFAC es útil cuando no hay datos experimentales a mano, pero se debe preferir la base de los datos experimentales a cualquier estimación.

Además, ha permitido otro avance en un campo muy importante. En efecto, dado que se basa en la estimación de propiedades de la mezcla a partir de la composición de la misma, esto es en base a un conjunto de grupos constituyente de las moléculas, no tardó mucho en plantearse el importante problema inverso. ¿Por qué no utilizar el método para, dadas las propiedades que le exigimos a la molécula, encontrar la estructura (grupos que la constituyen) de la misma?. Este es un problema típico por ejemplo cuando queremos especificar un solvente adecuado en la tarea de disolver un compuesto, o bien un agente extractivo en una tarea de separación, etc. Este problema implica no sólo el uso directo y numérico de la ecuación UNIFAC, ya que también se involucra un problema de estructuras en función de muchos sub-grupos, y como analizamos en los Capítulos I y II estos problemas exigen un modelado especial, en el cual pueden también utilizarse métodos de inteligencia artificial.

VII.4.9 Uso de datos experimentales para calcular constantes

Para ciertas mezclas, como vimos, en el equilibrio se cumple:

$$y_i \; P = \gamma_i^L \; P_{vi}^o \; x_i \qquad \textbf{(66)}$$

De esta ecuación es posible obtener el coeficiente de actividad si conocemos los datos de composición-presión de vapor de una mezcla. Las presiones de vapor P^o_{vi} de cada componente se pueden calcular por medio de la ecuación de Antoine o similares.

VII.4.9.1 Coeficientes de actividad a partir del azeótropo

Si el sistema forma un azeótropo es conveniente usarlo para calcular los coeficientes de actividad, porque los datos referentes a los azeótropos son más

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

abundantes (y a menudo más exactos) que los de otros puntos de la mezcla.

Esto es lógico puesto que el azeótropo es un punto especial, donde es más fácil hacer medidas exactas. Cuando se trabaja con datos experimentales es preferible asumir una actitud más bien escéptica con respecto a la exactitud de los mismos, suponiendo "a priori" que pueden ser inexactos. Es preferible contar con pocos datos confiables que disponer de gran cantidad de datos de dudosa procedencia.

Por eso recomendamos siempre que sea posible basarse en datos de un azeótropo obtenidos de fuentes respetables.

VII.4.9.2. Coeficientes de actividad a partir de los datos de la curva de equilibrio líquido-vapor

Desde el punto de vista matemático, la técnica anterior es una extrapolación a partir de un solo punto mientras que la que tratamos aquí es un ajuste a partir de un conjunto de datos. Formalmente es imposible decidir "a priori" cual puede ser más exacta, porque no sabemos si el error está igualmente o desigualmente repartido en todo el conjunto de datos. Se puede hacer un análisis estadístico de los mismos, mediante técnicas bastante fáciles y conocidas que permiten estimar el grado de dispersión del conjunto y a través del mismo tener una idea del margen de error probable que hubo en las determinaciones experimentales. Pero la estimación estadística solo indica una probabilidad, que no es una certeza.

Teniendo en cuenta todo esto estamos en condiciones de encarar el cálculo a partir de muchos puntos de equilibrio. Este puede ser el mejor método si los datos son exactos, o están afectados de un error bajo y más o menos constante en todos los puntos.

Se pueden seguir dos caminos para resolver este problema. El primer camino, que resulta menos complicado desde el punto de vista matemático, consiste en linealizar las ecuaciones para poder aplicar la técnica de mínimos cuadrados a fin de determinar los coeficientes de actividad como parámetros de ajuste, es decir los coeficientes de la recta de ajuste por mínimos cuadrados. Este camino nos proporciona valores menos exactos, porque al linealizar una ecuación que es fundamentalmente no lineal estamos distorsionando su forma y la distribución del error experimental. Este método se puede aplicar usando cualquier calculadora de mano que tenga rutinas estadísticas.

La segunda técnica requiere el uso de una herramienta computacional más sofisticada, un programa de regresión no lineal basado en la técnica de mínimos cuadrados generalizados y proporciona resultados más exactos.

En general la primera técnica (linealizar la ecuación) da resultados suficientemente exactos como para la mayoría de las aplicaciones prácticas, pero ciertos casos pueden requerir el método más arduo pero más exacto.

VII.4.9.3 Coeficientes de actividad a partir de la discrepancia de energía libre

Como sabemos, la discrepancia de energía libre de una mezcla se puede

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

calcular por medio de la siguiente ecuación.

$$G^E = RT \sum_{i=1}^{NC} x_i \ln \gamma_i \qquad \textbf{(67)}$$

Para una mezcla binaria, la ecuación anterior se puede reordenar de la siguiente manera:

$$G^E/(RT\ x_1\ x_2) = \frac{\ln \gamma_1}{x_2} + \frac{\ln \gamma_2}{x_1} \qquad \textbf{(68)}$$

Es posible encontrar expresiones para la discrepancia de energía libre basadas en las ecuaciones de Margules de sufijo triple, de Van Laar y de Wilson. También existen expresiones análogas para las ecuaciones NRTL y UNIQUAC. Para ejemplificar, tomemos la ecuación de Margules.

Para ésta, la expresión que proporciona la discrepancia de energía libre en una mezcla binaria es la siguiente.

$$G^E/(RT) = x_1\ x_2\ [P + Q(x_1 - x_2)] \qquad \textbf{(69)}$$

Reordenando y recordando que $x_1 + x_2 = 1$ tenemos:

$$G^E/(RT\ x_1\ x_2) = P + Q(2x_1 - 1) \qquad \textbf{(70)}$$

Si se dispone de datos experimentales de discrepancias de energía libre en función de la composición de la mezcla es posible calcular los coeficientes P y Q.

Las constantes P y Q no son las mismas de la ecuación sino que se relacionan con ellas de este modo:

A = P + 3Q B = -4Q

Los valores de P y Q se obtienen de las discrepancias de energía libre a $x_1 = 0$ y $x_2 = 1$. Se ha sugerido que las ecuaciones anteriores proporcionan una prueba para determinar si la ecuación de Margules resulta adecuada para representar un determinado sistema. Si la gráfica de la ecuación (70) es una recta, se acepta que la

ecuación de Margules se puede usar. Se pueden usar razonamientos parecidos para manipular las otras ecuaciones arriba mencionadas y calcular los parámetros correspondientes.

VII.4.9.4 Coeficientes de actividad a dilución infinita

Los coeficientes de actividad a dilución infinita son útiles para evaluar las constantes de las ecuaciones de Margules, Van Laar y Wilson, particularmente a partir de datos de discrepancia de energía libre. Por ejemplo, consideremos la ecuación de Van Laar (35).

$$\ln \gamma_1 = \frac{A_{12}}{\left(1 + \frac{A_{12}\ x_1}{A_{21}\ x_2}\right)^2} \quad ; \quad \ln \gamma_2 = \frac{A_{21}}{\left(1 + \frac{A_{21}\ x_2}{A_{12}\ x_1}\right)^2}$$

A dilución infinita, para la primera cuando $x_1 \rightarrow 0$ y para la segunda cuando $x_2 \rightarrow 0$ tenemos:

$$\ln \gamma_1^{\infty} = A_{12}$$

$$\ln \gamma_2^{\infty} = A_{21}$$

El cálculo mediante la ecuación de Van Laar es la forma más simple de todas. Se pueden encontrar otras formas para las ecuaciones de Margules o Wilson.

Si se usa la ecuación NRTL, que tiene tres parámetros, sólo se pueden calcular dos de ellos mediante coeficientes de actividad a dilución infinita, debiendo calcular el tercero de otra forma.

VII.4.9.5 Correlación de Pierotti, Deal y Derr para estimar coeficientes de actividad a dilución infinita

Esta correlación se puede usar para estimar valores de coeficientes de actividad a dilución infinita de agua, hidrocarburos y sustancias orgánicas tales como esteres, aldehídos, alcoholes, cetonas, nitrilos etc en la zona de temperaturas desde 25 a 100 °C. La correlación está organizada tomando pares soluto-solvente y utiliza una serie de diez ecuaciones con cinco variables de ajuste en función de la cantidad de átomos de carbono en el soluto y en el solvente. No daremos un detalle de las mismas aquí por razones de espacio. Las ecuaciones y variables se encuentran tabuladas en las referencias (Reid, Prausnitz y Poling), (Treybal).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El error promedio (aritmético) es alrededor del 8% cuando $0.1 < \gamma^{\infty} < 10$. La exactitud varía considerablemente en distintos pares binarios.

VII.5. EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR A ALTAS PRESIONES

En la práctica industrial se realizan muchas operaciones a presión elevada. En particular las separaciones líquido-vapor en la industria del petróleo se caracterizan porque se realizan a alta presión comparada con la usual en la industria química, que suele destilar a presiones normales o menores a la atmosférica. En la industria petroquímica muchas destilaciones involucran especies de estructura muy similar (por ejemplo hidrocarburos pertenecientes a una misma serie homóloga tales como alcanos, o isómeros tales como los butadienos) de modo que el coeficiente de actividad en la fase líquida de cada componente se puede considerar unitario. En la fase vapor, en cambio, el comportamiento es altamente no ideal.

Este comportamiento tiene un efecto cada vez más marcado a medida que aumenta la presión, y cuando se llega a las cercanías del punto pseudo crítico de la mezcla se produce una serie de fenómenos que requieren un estudio especial. Esto tiene una gran importancia en la industria petroquímica ya que muchos hidrocarburos tienen un valor comparativamente bajo de presión crítica, de modo que cuando tales especies están presentes en gran cantidad influyen mucho en el punto pseudo crítico de la mezcla. El principal efecto de la presión elevada es hacer más difíciles los cálculos de propiedades termodinámicas por varias razones.

- En primer lugar, el coeficiente de fugacidad de la fase vapor se debe calcular por medio de una ecuación de estado adecuada para altas presiones mientras que a baja presión a menudo podemos hacerlo igual a uno.

- En segundo lugar, las presiones elevadas también afectan el comportamiento de la fase líquida, en la medida en que esta afecte el volumen específico de la fase líquida. En líquidos comparativamente menos compresibles este efecto tiene menor importancia que en líquidos más compresibles. En la región crítica ese efecto puede ser marcado.

- En tercer lugar, a menudo las mezclas tienen algunos componentes por encima de sus temperaturas críticas. Esto presenta el problema de que resulta muy difícil evaluar el estado standard de fugacidad de esos componentes. En efecto, normalmente usamos como estado standard el de líquido puro a la temperatura y presión de la mezcla. Pero para un componente que se encuentra a temperatura mayor que la crítica para ese componente el estado líquido a la temperatura y presión de la mezcla es hipotético, mejor dicho no existe. Este problema tiene sus bemoles ya que las posibles soluciones involucran tal complicación computacional que no son muy aplicables en trabajos comunes de ingeniería.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- En último término, en el caso de equilibrio líquido-vapor a alta presión nos encontramos con fenómenos críticos anómalos, por ejemplo condensación retrógrada, y debido a que estos fenómenos no están bien comprendidos, es difícil construir modelos que los representen.

VII.5.1 Modelos para la fase vapor a presiones altas

Como vimos en el Capítulo VI, para el cálculo de la constante o factor K podemos utilizar ecuaciones de estado capaces de describir los coeficientes de fugacidad tanto en fase vapor como en fase líquida, según las siguientes relaciones.

$$RT \ln \varphi_i^L = \int_{v^L}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,v,n} - \frac{RT}{V} \right] dV - RT \ln Z^L$$

$$RT \ln \varphi_i^V = \int_{v^v}^{\infty} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,v,n} - \frac{RT}{V} \right] dV - RT \ln Z^v$$

El coeficiente de compresibilidad para cada fase es:

$$Z^L = \frac{P\ V^L}{RT} \qquad Z^v = \frac{P\ V^v}{RT}$$

Debido a la naturaleza fuertemente no lineal de las ecuaciones de estado que se usan y al proceso recursivo a que esto conduce, aparecen complicaciones, como la existencia de raíces múltiples. En efecto, por razones de simplicidad computacional a menudo se emplea la misma ecuación de estado para describir las propiedades de la fase vapor y de la fase líquida. Cuando se calcula el volumen, en las ecuaciones cúbicas aparecen tres raíces, o sea tres volúmenes; el menor corresponde al volumen líquido, el intermedio no tiene significado físico y el mayor corresponde al volumen de gas. La única forma segura de no tener problemas con las raíces es partir de un valor inicial lo suficientemente cercano al real como para evitar problemas de convergencia. También existe un método analítico para resolver las raíces de la ecuación de tercer grado, pero no se lo utiliza debido a que insume mayor tiempo computacional que los métodos numéricos, si se trabaja en forma adecuada.

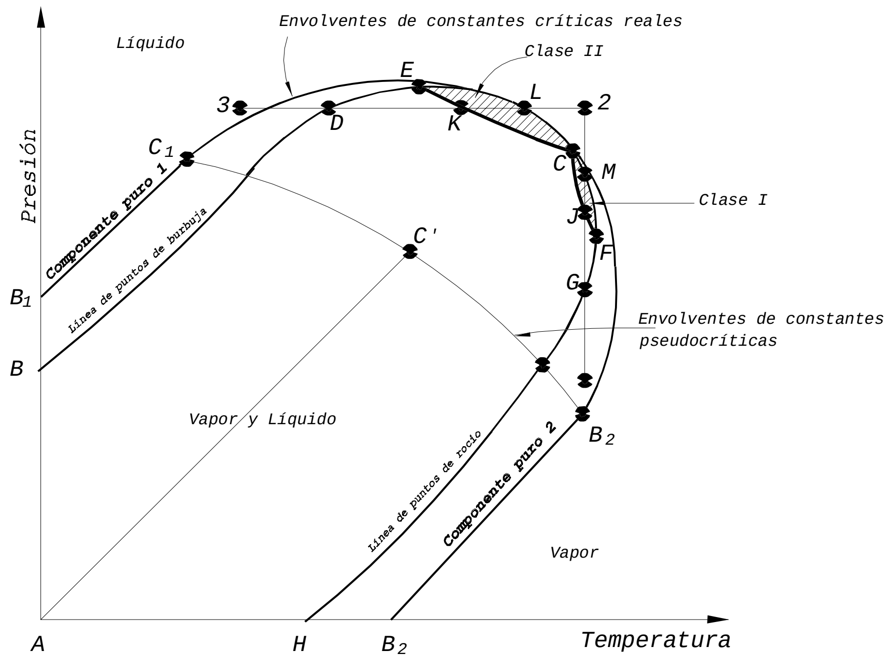
Las ecuaciones más usadas para generar modelos que representen exactamente el comportamiento a presiones elevadas son las de R-K, S-R-K, P-R y L-K. Esta última es computacionalmente más complicada que las cúbicas pero

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

produce resultados algo más exactos en muchos casos.

VII.5.2 Fenómenos críticos en las mezclas a altas presiones

Para entender los problemas que se presentan en las cercanías del punto pseudo crítico de una mezcla nos referiremos a la siguiente figura.



Fenómenos críticos en mezclas

El comportamiento de un componente puro viene representado por la curva AC', cuya presión y temperatura críticas son las del punto C'. Para un sistema de un solo componente la zona situada a la izquierda de la curva AC' representa la zona de vapor y la situada a su derecha la zona de líquido.

La curva BDECFGH es la llamada línea de frontera de una mezcla que tuviese la misma volatilidad media que el compuesto representado por la curva AC', pero formada por dos sustancias con presiones de vapor correspondientes a la curva B_1 C_1 y B_2 C_2 . El área encerrada por la línea de frontera representa la zona de dos fases de la mezcla.

El punto C representa el punto pseudo crítico de la mezcla. Por lo tanto la zona situada por encima de la curva BDEC es la región de licuefacción completa. El punto C no corresponde a la temperatura máxima de existencia de la fase líquida sino

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

al punto de la línea de frontera donde las fases líquida y vapor no se pueden distinguir y en el que se unen las curvas de puntos de rocío y de puntos de burbuja. Se lo denomina punto crítico por analogía con el verdadero punto crítico de una sustancia pura. Por lo general los valores de presión y temperatura que corresponden a C son mayores que la presión y temperatura críticas de una sustancia pura de la misma volatilidad media.

La curva de puntos de rocío pasa por un máximo de temperatura en F. Por lo tanto en una mezcla el líquido puede existir a una temperatura mayor a la pseudo crítica, cosa que es imposible en una sustancia pura. A la temperatura máxima de F se la denomina temperatura de condensación crítica. En muchas mezclas la curva de puntos de burbuja pasa por un máximo como en E donde la presión es mayor que la que corresponde a C. Aquí tenemos una nueva anomalía porque el líquido puede existir a una presión mayor que la crítica. Las áreas sombreadas FJCM y EKLC se llaman zonas de condensación retrógrada por lo siguiente. Si la mezcla inicialmente se encuentra en las condiciones del punto 1 desde donde se la comprime a temperatura constante como indica la recta 1-2 al llegar a G aparece una fase más densa porque comienza a condensarse el componente menos volátil. Al seguir aumentando más la presión continúa condensando líquido hasta pasar por un máximo en el punto J y después disminuye, desapareciendo por completo en M. Este tipo de condensación retrógrada que ocurre en la zona FJCM se llama de primera clase.

La denominación condensación retrógrada se refiere a que ocurre a pesar de que la acción que la produce no debiera producirla si esta fuera una sustancia pura. Si la mezcla líquida en las condiciones de 3 se calienta a presión constante aparece en el punto D sobre la línea de puntos de burbuja una fase más liviana debida a la evaporación del componente más volátil que alcanza su valor máximo en el punto K y después disminuye desapareciendo en L. La zona EKCL se llama de condensación retrógrada de segunda clase. Las líneas EKC y FJC se definen por medio de las tangentes a las curvas de calidad en la región de dos fases. Hay varios algoritmos que permiten construirlas; su cálculo es complejo.

La condensación retrógrada también puede ocurrir por cambio de concentración a temperatura y presión constantes. El fenómeno de condensación retrógrada es el responsable de las denominaciones "gas licuado de petróleo" (LPG) que se origina al extraer el gas del pozo en el que se encuentra a alta presión. Cuando se descomprime el gas se condensa la gasolina (nafta liviana) ya que la mezcla se encuentra por encima de la curva de puntos de rocío, a la derecha del punto pseudo crítico. El gas residual se puede comprimir nuevamente y reciclarse con lo que las fracciones más livianas se reincorporan a la fase gaseosa recuperándose posteriormente gracias a la condensación retrógrada que ocurre durante la expansión. La condensación retrógrada se presenta solo en las mezclas en las que el punto C se encuentra entre los puntos E y F.

La curva que contiene a las de puntos de burbuja y puntos de rocío se denomina envolvente de fases. Tiene mucha importancia práctica determinar la forma

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de la misma para determinar si habrá o no condensación retrógrada de primera o segunda especie, o ambas. Existen algoritmos que permiten calcular los puntos de la envolvente, así como temperaturas de rocío y burbuja, y presiones de rocío y burbuja. Se basan casi siempre en las ecuaciones mencionadas precedentemente.

Cuando hay presentes sustancias polares o que forman puente de hidrógeno estos modelos no resultan satisfactorios. En estos casos se han propuesto varios enfoques que emplean parámetros de asociación con moderado éxito, generalmente con ecuaciones tipo B-W-R.

VII.6 SELECCIÓN DEL MÉTODO PARA LA PREDICCIÓN DE PROPIEDADES DEL EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

En la discusión precedente de diversos métodos de estimación de propiedades termodinámicas hemos tratado de cubrir la mayoría de los que tienen interés para el ingeniero químico no especializado. En esta etapa debemos confesar que abandonamos todo intento de generalidad. El campo de estudio es tan grande que sería imposible incluir todos los criterios de selección posibles. Solo se han incluido a grandes rasgos las alternativas más habituales, y se ha dado preferencia a los métodos que se encuentran en los paquetes comerciales o a los que se pueden programar con relativa facilidad. Por ejemplo no se incluye la ecuación de Lee-Kesler, no porque no se recomiende su uso, sino porque resulta más compleja de implementar desde el punto de vista algorítmico y computacional.

Muchos de los criterios en los que se basa la lógica que se usa ya han sido expuestos cuando se trató cada método en forma de observaciones o recomendaciones, y otros surgen de las limitaciones inherentes a cada uno de ellos. Algunos casos particulares y muy específicos exigen correlaciones especiales, que no son de aplicación general.

En su mayoría, tanto en los manuales como en línea, los simuladores comerciales tienen una sección específica destinada a facilitar al usuario la tarea de selección de un método de estimación para una dada mezcla y propiedad a calcular.

Los más completos poseen programas basados en herramientas de inteligencia artificial, los cuales empleando una base de conocimiento que poseen compilada en reglas todas las recomendaciones aquí planteadas y muchas otras que se derivan explícitamente de las particularidades de los diversos métodos o bien de la experiencia universal de aplicación (errores promedios cometidos, casos de inaplicabilidad), brindan al usuario un listado de métodos aplicables dadas las condiciones de la mezcla (temperatura, presión y componentes). En el capítulo II hemos discutido algunas someras particularidades de tales instrumentos computacionales y el tipo de modelos que solucionan , en los cuales se dispone más que de conocimiento expresable en ecuaciones, de un conjunto de reglas prácticas con las cuales decidir.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA o RECOMENDADA

- Manual del Ingeniero Químico, 6 ed. - Perry R. H., ed.
- Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química - Smith y Van Ness.
- Termodinámica Química para Ingenieros - Balzhiser, Samuels y Eliassen.
- The Properties of Gases and Liquids - Reid, Prausnitz y Poling (cuarta edición inglesa).
- Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering - Henley y Seader.
- Handbook of Chemical Engineering Calculations - Chopey y Jocks, ed.
- Principios de los Procesos Químicos - Houghen, Watson y Ragatz.
- Elements of Fractional Distillation - Robinson y Gilliland.
- Classical Thermodynamics of Nonelectrolyte Solutions - Van Ness H.C.
- Liquid Extraction - Treybal R.E.
- Need Equilibrium Ratios? Do It Right - Lenoir y Koppany - Hydrocarbon Processing November 1967, vol. 46, nro. 11, pág. 249.
- Propiedades de los Gases y de los Líquidos - Reid y Sherwood (traducción de la segunda edición inglesa).
- Handbook of Chemistry and Physics - Weast, R. C., ed.
- Lange's Handbook of Chemistry - Dean, J. A., ed.
- Chemical Process Principles Charts - Houghen y Watson.
- Improve Vapor Pressures Prediction - Lee y Kesler - Hydrocarbon Processing, July 1980, pág. 163.

CAPÍTULO VIII

ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICA

Por
Jorge A. Rodríguez

VIII.1. INTRODUCCIÓN

En este capítulo trataremos los métodos de estimación de propiedades termodinámicas relacionadas principalmente con el cálculo de la entalpía de una mezcla, de una manera muy resumida. Para ello se deberá, además de estudiar los métodos de estimación de calores latentes de vaporización, profundizar en la estimación de la capacidad calorífica, tanto de gases como de líquidos, ya sean puros o mezclas multicomponentes. Además, para mezclas no-ideales, deberán estimarse los efectos de mezclado, esto es las desviaciones (desde el punto de vista energético) de la mezcla con respecto al comportamiento ideal.

VIII.1.1. Entalpías de Exceso

Como vimos en el Capítulo V, para calcular la entalpía de una mezcla podemos recurrir a la ley de aditividades, lo cual nos da la entalpía de la mezcla en función de las entalpías de los componentes puros. Para el cálculo de estas últimas, debemos utilizar las propiedades a discutir en las secciones siguientes y las ecuaciones generales vistas en el Capítulo V. No obstante, para mezclas no ideales sabemos que existen grandes desviaciones con respecto a la idealidad (aditividad) representadas por la entalpía de exceso.

Luego, resulta imprescindible la estimación de dicha cantidad para evaluar la entalpía de la mezcla. Para ello, como vimos, debemos utilizar las expresiones que vinculan la entalpía de exceso con los coeficientes de fugacidad o actividad. Estas relaciones las discutimos someramente en el Capítulo V y provienen de las relaciones generales que nos brinda la termodinámica.

Por otra parte, en el Capítulo anterior discutimos cómo estimar los coeficientes de fugacidad o los de actividad. Vimos que para ello podemos utilizar relaciones PVT o bien métodos para la estimación directa de los coeficientes de actividad.

A modo de ejemplo, si pretendemos evaluar la entalpía de exceso (H^E) por medio de la ecuación

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$H^E = \sum_{i=1}^{NC} x_i \, \overline{H}_i^E = RT \sum_{i=1}^{NC} x_i \ln \gamma_i \qquad \textbf{(1)}$$

vemos que todos los métodos discutidos en el capítulo anterior son válidos, siempre y cuando sean aplicables a la mezcla a tratar.

En los siguientes puntos discutiremos en primer lugar los métodos o procedimientos para estimar entalpías de compuestos puros, comenzando con los métodos complementarios para tal cálculo, como ser el calor latente de vaporización y las capacidades caloríficas.

Por último, muy someramente se mencionarán algunos métodos para la estimación de propiedades de transporte, por ejemplo viscosidad, tensión superficial, difusividad, conductividad térmica, etc.

De los muchos métodos publicados, trataremos aquellos que siendo más exactos requieran menor cantidad de información y sean más simples. No siempre se encuentra el método ideal que cumpla estos tres requisitos por lo que daremos atención prioritaria a los que cumplen el primero, y en algunos casos puede que el segundo y el tercero inviertan su orden de importancia.

VIII.2. MÉTODOS PARA LA ESTIMACIÓN DEL CALOR LATENTE DE VAPORIZACIÓN

El calor latente de vaporización, también llamado entalpía de vaporización, se puede estimar mediante dos clases de técnicas:

a) las basadas en una evaluación del calor latente en base a la curva de presión de vapor-temperatura y la ecuación de Clausius-Clapeyron.

b) las correlaciones basadas en la ley de estados correspondientes o en ecuaciones empíricas.

Existe una considerable incertidumbre con respecto al origen de los datos publicados de calor latente de vaporización, debido a que muchos valores supuestamente "experimentales" en realidad fueron obtenidos indirectamente a través de la ecuación de Clausius-Clapeyron. Por ejemplo los valores de las tablas de propiedades de hidrocarburos publicadas por API se obtuvieron por medio de mediciones de la pendiente de la curva presión de vapor-temperatura que a su vez no es experimental sino que se obtuvo mediante la ecuación de Antoine y la evaluación de ΔZ por medio de una ecuación de estado virial.

Siempre existe incertidumbre cuando se evalúa la pendiente de la curva presión de vapor-temperatura porque es esencialmente un proceso de derivación. La derivación numérica o gráfica aumenta considerablemente los errores experimentales. Por ejemplo, si se diferencian datos obtenidos a partir de la ecuación de Antoine al

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

derivar desaparece la constante A porque su derivada es nula. Eso deja solamente las constantes B y C, poniendo mayor peso en la constante C. Por lo tanto, las inexactitudes de C pesan mucho en el valor calculado del calor latente de vaporización.

No se puede establecer una diferencia que permita definir una clara preferencia entre una u otra clase, pero posiblemente los métodos basados en la ecuación de Clausius-Clapeyron sean ligeramente superiores cuando se cuenta con muchos datos de la curva y se usa un buen algoritmo de derivación numérica.

VIII.2.1 Correlaciones para calor latente de vaporización basadas en la ecuación de Clausius-Clapeyron

Nuestro problema es determinar ΔH_v en las condiciones T+ y P+. Suponemos tener una curva densa (con muchos puntos muy cercanos entre sí) y con datos precisos. Intuitivamente nos damos cuenta que la derivada se puede aproximar por diferencias finitas, es decir (con gran error):

$$\frac{dP}{dT} \cong \frac{\Delta P}{\Delta T} \qquad \textbf{(2)}$$

A su vez la diferencia $v_v - v_L$ se puede aproximar mediante el factor de compresibilidad:

$$v_v = \frac{Z_v\ RT}{P} \quad ; \quad V_L = \frac{Z_L\ RT}{P}$$

Como las condiciones del vapor y del líquido son de equilibrio, P y T son iguales

$$v_V - v_L = \frac{Z_v\ RT}{P} - \frac{Z_L\ RT}{P} = (Z_v - Z_L)\ \frac{RT}{P} = \Delta Z\ \frac{RT}{P} \qquad \textbf{(3)}$$

El valor ΔZ suele estar alrededor de 0.95 (± 1%) para la mayoría de las sustancias y se puede estimar. Un modo práctico para hacerlo es mediante la siguiente ecuación (Haggenmacher).

$$\Delta Z = \sqrt{1 - \frac{1}{Pc\ Tbr^3}}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Otra correlación propone (Thomson):

$$\log_{10} \Delta Z = 2.106x^2 - 1.0268x \qquad para\ 0 < \frac{Pr}{Tr} < 0.2 \qquad \textbf{(4)}$$

$$\log_{10} \Delta Z = 0.136x^2 - 0.645x - 0.0185 \qquad para\ 0.2 < \frac{Pr}{Tr} < 1$$

$$\Delta Z = 1 - 0.97 \frac{Pr}{Tr} \qquad para\ \frac{Pr}{Tr} < .1$$

donde $x = -\log_{10}\left(1 - \frac{Pr}{Tr}\right)$.

Cualquiera de las correlaciones anteriores se puede aplicar en un esquema de evaluación partiendo de datos experimentales o bien obtenidos de alguna correlación aplicando ecuaciones de estado (relaciones PVT) ya vistas. A partir de la ecuación de Clausius-Clapeyron y contando con una curva Presión de vapor-Temperatura experimental o calculada por un buen método de estimación se puede aplicar el esquema de derivación numérica de Douglas-Avakian; este esquema toma siete puntos, distribuidos tres a la derecha y tres a la izquierda del punto central, en el cual se quiere obtener ΔHv. Así los puntos quedan identificados como sigue: (Pv_{-3}, T_{-3}), (Pv_{-2}, T_{-2}), (Pv_{-1}, T_{-1}), (Pv_0 ,T_0), (Pv_1,T_1), (Pv_2 ,T_2), (Pv_3 ,T_3). La aproximación numérica a la derivada queda expresada como sigue:

$$\frac{dPv}{dT} \cong \frac{1}{\Delta T}\left[\frac{397 \sum_{i=-3}^{3} i\ Pv_i}{1515} - \frac{7 \sum_{i=-3}^{3} i^3\ Pv_i}{216}\right] \qquad \textbf{(5)}$$

Nota: evidentemente Pv_0 queda excluido ya que i = 0. Aquí ΔT es el intervalo de separación de los datos de temperatura. Este esquema sólo se puede aplicar en casos en que los valores de temperatura estén igualmente espaciados. Entonces la ecuación de Clausius-Clapeyron queda así:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dPv}{dT} = \frac{\Delta Hv}{T(v_v - v_L)} = \frac{\Delta Hv \; Pv}{RT^2 \; \Delta z} \rightarrow \Delta Hv = \frac{R \; T^2 \; \Delta Z}{Pv} \frac{dPv}{dT} \qquad \textbf{(6)}$$

También se puede aplicar otro esquema derivado de la correlación de Lee-Kesler:

$$\frac{-d \; \ln \; Pvr}{d\left(\frac{1}{Tr}\right)} = \frac{\Delta Hv \; Tr}{\Delta v \; P} \rightarrow \Delta Hv = \frac{-d \; \ln \; Pvr}{d\left(\frac{1}{Tr}\right)} \Delta Z \; R \; Tc \qquad \textbf{(7)}$$

$$\frac{-d \; \ln \; Pvr}{d\left(\frac{1}{Tr}\right)} = 6.09648 - 1.28862Tr + 1.016Tr^3 + \omega(15.6875 - 13.4721Tr + 2.615Tr^7)$$

Por último tenemos la posibilidad de estimar la pendiente de la curva de presión de vapor **-** temperatura a través de la ecuación de Antoine, si las presiones de vapor son menores de 1500 mm Hg.

$$\frac{dPv}{dT} = \frac{2.303 \; B \; Pv}{(t + c)^2} = \frac{\Delta Hv}{T(v_v - v_L)} \qquad \textbf{(8)}$$

Como para presiones de este orden el vapor se comporta como gas ideal, la ecuación se simplifica a:

$$\frac{\Delta Hv}{T(v_v - v_L)} \cong \frac{\Delta Hv}{Tv_v} = \frac{\Delta H_v \; Pv}{R \; T^2} \Rightarrow \Delta Hv = \frac{2.303BRT^2}{(t + c)^2} \qquad \textbf{(9)}$$

Existe otra forma de atacar el problema de la estimación de Δv. En vez de evaluar Δv en forma indirecta, estimando Δz por medio de las correlaciones de Haggenmacher o Thomson, se puede evaluar Δv directamente si se calculan v_v y v_L en forma individual mediante ecuaciones de estado. La ecuación de Clapeyron se puede expresar:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dPv}{dT} = \frac{\Delta Hv}{T(v_v - v_L)} = \frac{\Delta Hv}{T \ \Delta v} \Rightarrow \Delta Hv = T \ \Delta v \ \frac{dPv}{dT} \qquad \textbf{(10)}$$

donde $\Delta v = v_v - v_L$.

VIII.2.2 Correlaciones para calor latente de vaporización basadas en la ley de estados correspondientes

Existen muchas correlaciones de este tipo porque a menudo no se dispone de los datos experimentales necesarios para aplicar la ecuación de Clausius-Clapeyron. Esta se puede expresar en forma reducida de la siguiente forma:

$$d \ \ln \ Pvr = \frac{-\Delta Hv}{R \ Tc \ \Delta Z} \ d \ \frac{1}{Tr} \qquad \textbf{(11)}$$

donde ΔHv es el calor latente de vaporización, Z es el factor de compresibilidad y ΔZ es la diferencia de factores de compresibilidad del líquido y el vapor.

Llamamos "entalpía de vaporización reducida" al término:

$$\frac{-\Delta Hv}{R \ Tc \ \Delta Z} \qquad \textbf{(12)}$$

Vemos de inmediato que la entalpía de vaporización reducida es una función de ΔZ y de la derivada D

$$D = \frac{d \ \ln \ Pvr}{d(1/Tr)} \qquad \textbf{(13)}$$

En los métodos basados en la ley de estados correspondientes la entalpía de vaporización reducida es una función de ΔZ, D y un tercer parámetro.

VIII.2.3 Correlación de Pitzer modificada

La correlación generalizada de estados correspondientes original de Pitzer ha sido modificada y mejorada por diversos autores. La siguiente versión parece ser la más exacta.

$$\frac{\Delta Hv}{RTc} = 7.08(1 - Tr)^{0.354} + 10.95\omega(1 - Tr)^{0.456} \qquad \textbf{(14)}$$

ΔHv está dado en J/gmol. Esta correlación da muy buenos resultados a altas presiones hasta cerca del punto crítico, y es preferible en la zona de altas presiones y temperaturas a cualquier otra; su desempeño en la zona baja no es tan bueno pero resulta satisfactorio. Como ocurre con todas las correlaciones de estados correspondientes, su uso en sustancias polares o asociadas conduce a errores considerables.

VIII.2.4. Correlación de Riedel

Riedel propuso la ecuación que presentamos a continuación. Esta ecuación proporciona el calor latente de ebullición en el punto normal de ebullición de modo que si se desea a otra temperatura habrá que recalcularlo a esa temperatura.

$$\frac{\Delta Hvb}{Tb} = \frac{2.17\ (\ln Pc - 1.013)}{0.930 - Tbr} \qquad \textbf{(15)}$$

ΔHvb está dado en cal/gr. Tbr es la temperatura reducida de ebullición normal. La exactitud es bastante buena (generalmente errores menores del 5%).

Ejemplo

Calcular el calor latente de vaporización del metano en las siguientes temperaturas (°C): t_1 = -161.49; t_2 = -159.49; t_3 = -156.71; t_4 = -153.94; t_5 = -140.05; t_6 = -123.38; t_7 = -106.72; t_8 = -90.05; t_9 = -82.12.

Valores experimentales: la tabla siguiente resume los resultados publicados.

t (°C)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
$\Delta Hv \frac{lt\ atm}{gmol}$	80.69	79.85	79.00	78.11	73.11	64.97	54.11	36.08	0.00

Datos

Tb = -161.49°C = 111.67°K   Tc = -82.12°C = 191.04°K   Pc = 46.06 ata

ω = 0.008 $Z_{R\alpha}$ = 0.2876

Solución

1) A partir de la ecuación de Clapeyron usando la ecuación de Antoine:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\Delta Hv = \frac{2.303 BRT^2}{(t + c)^2} = \frac{2.393(389.93)(0.082)T^2}{(t + 266)^2}$$

Los resultados se presentan en forma tabular:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	84.14	83.94	83.67	83.42	*82.34	*81.31	*80.49	*79.84	*73.68
Error (%)	4.28	5.12	5.91	6.80	12.63	25.15	48.76	121.27	∞

Como se puede observar estudiando los errores, los puntos marcados con un asterisco son aquellos en los que falla esta técnica. La causa es que para esos puntos la presión de vapor supera los 1500 mm Hg, límite superior de validez de la ecuación de Antoine.

2) A partir de la ecuación de Clapeyron calculando los volúmenes de vapor y de líquido mediante ecuaciones de estado:

Elegimos la ecuación de Peng-Robinson para evaluar el volumen de vapor y la ecuación de Spencer y Danner para evaluar el volumen de líquido.

$$P = \frac{R\ T}{v_v - b} - \frac{\alpha(T)}{v_v(v_v + b) + b(v_v - b)}$$ Peng-Robinson

donde: $\alpha(T) = 0.45724 \frac{R^2\ Tc^2}{Pc}\ \varphi r$, $b = 0.07780\ \frac{R\ Tc}{Pc}$

$\varphi r = (1 + \varphi(1 - \sqrt{Tr}))^2$, $\varphi = 0.37646 + 1.54226\ \omega - 0.26992\ \omega^2$

$$v_L = \frac{R\ Tc}{Pc}\ Z_{R\alpha}^{(1+(1-Tr)^{2/7})}$$ Spencer y Danner

Los resultados se presentan en forma tabular:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.05	81.46	80.58	79.66	74.08	65.22	53.25	33.83	---
Error (%)	1.69	2.01	2.00	1.98	1.33	0.38	-1.59	-6.24	---

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El calor latente no se calculó en el último punto porque es el crítico.

3) Correlación de Pitzer modificada:

$$\frac{\Delta Hv}{RTc} = 7.08(1 - Tr)^{0.354} + 10.95\omega(1 - Tr)^{0.456}$$

Los resultados se presentan en forma tabular:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.26	81.52	80.47	79.39	73.56	65.21	54.27	36.31	0.00
Error (%)	1.95	2.09	1.86	1.64	0.62	0.37	0.30	0.64	0.00

Dentro de este contexto, los distintos métodos que hemos revisado tienen mas o menos la misma exactitud cuando se analiza su comportamiento con muchas clases distintas de compuestos y en condiciones variables. Alguno de ellos resulta más eficaz cuando se lo aplica a casos específicos, pero por razones de espacio resulta imposible hacer un estudio detallado de cada uno.

VIII.2.5 Influencia de la temperatura en el calor latente de vaporización

Existen varios métodos para estimar la variación del calor latente de vaporización con la temperatura. Watson propuso un método que cuenta con la adhesión general por su comparativa exactitud y simplicidad. Permite obtener ΔHv a T, conocidos ΔHvo a To. Estrictamente, como sabemos, ΔHv es una diferencia de entalpías y por lo tanto será función de P y T. Al despreciar la influencia de P se comete un error que es tanto más grave cuanto más alejadas estén las condiciones de ΔHv y ΔHvo. Por lo tanto, conviene usar la regla de Watson con precaución para obtener resultados razonables.

$$\Delta Hv_{T1} = \Delta Hv_{T0} \left(\frac{1 - Tr1}{1 - Tr0} \right)^n \qquad \textbf{(16)}$$

Se ha discutido mucho sobre el valor más correcto para *n*. Uno de los criterios que se usan es considerar *n* un parámetro de ajuste y obtener el valor que mejor ajusta una serie de valores experimentales. Esto hace que *n* dependa de cada sustancia pura; se han compilado listas de valores de *n* para diversas sustancias. La

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

referencia (Thakore, Miller y Yaws, 1996) lista 61 sustancias comunes.

Otro criterio apunta a considerar *n* como un parámetro general, válido para cualquier sustancia, y correlacionarlo contra los parámetros propios de cada una. El valor generalizado más comúnmente aceptado para *n* es 0.38 dado originalmente por Watson, pero se puede calcular para una sustancia no listada en la literatura por las siguientes relaciones:

$$a)\ n = 0.74\ Tbr - 0.116 \qquad para\ 0.57 < Tbr < 0.71$$

$$c)\ n = 0.41 \qquad para\ Tbr > 0.71$$

$$b)\ n = 0.30 \qquad para\ Tbr < 0.57 \qquad \textbf{(17)}$$

Otros autores recomiendan estimar *n* a partir del calor latente de vaporización en el punto normal de ebullición y de la temperatura normal de ebullición. Esta correlación se considera más exacta que las anteriores.

$$n = \left(0.00264\ \frac{\Delta Hvb}{R\ Tb} + 0.8794 \right)^{10} \qquad \textbf{(18)}$$

Para 0.3 < Tr < 0.95 el error promedio es de 1.5%. Nótese de paso que el cociente ΔHvb/Tb no es otra cosa que la entropía de vaporización normal, y que el cociente ΔHvb/R/Tb resulta adimensional. También se ha sugerido correlacionar ΔHv con la temperatura y la clase de fluido. Esta correlación es totalmente diferente del antiguo enfoque de Watson y se presenta en función del calor latente de vaporización en el punto normal de ebullición. La ecuación es la siguiente.

$$\Delta Hv = \Delta Hvb\ \frac{Tr}{Tbr}\ \frac{X + X^{q}}{1 + X^{p}} \qquad \textbf{(19)}$$

donde:

$$X = \frac{Tr}{Tbr}\ \frac{1 - Tr}{1 - Tbr}$$

Los parámetros p y q se obtienen de la tabla siguiente:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Especie química	**q**	**p**
Metales líquidos	0.20957	-0.17467
Líquidos ideales (*)	0.14543	0.52740
Líquidos orgánicos e inorgánicos	0.35298	0.13856

(*) Se considera líquidos ideales al He, H_2 , D_2 y Ne.

Comparando los valores estimados mediante la ecuación (19) con los que estima la ecuación (16) con n = 0.38 se observa que los valores de ΔHv de la (19) son un poco menores a los de la (16) y en general los errores son algo mayores en la mayoría de los casos, pero de orden de magnitud comparable.

Ejemplo

Calcular el calor latente de vaporización del metano por medio de la correlación de Riedel y la regla de Watson en las siguientes temperaturas (°C):

t_1 = -161.49; t_2 = -159.49; t_3 = -156.71; t_4 = -153.94; t_5 = -140.05;
t_6 = -123.38; t_7 = -106.72; t_8 = -90.05; t_9 = -82.12.

Valores experimentales. La tabla siguiente resume los resultados publicados:

t (°C)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
$\Delta Hv \frac{lt\ atm}{gmol}$	80.69	79.85	79.00	78.11	73.11	64.97	54.11	36.08	0.00

Datos

Tb = -161.49°C = 111.67°K Tc = -82.12°C = 191.04°K Pc = 46.06 ata

Solución

1) Correlación de Riedel: $\frac{\Delta Hv}{Tb} = \frac{2.17\ (\ln\ Pc\ -\ 1)}{0.93\ -\ Tbr}$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$Tbr = \frac{111.67}{191.04} = 0.5845372 \rightarrow \frac{\Delta Hv}{Tb} =$$

$$= 17.776101 \rightarrow \Delta Hv = 1985.0572 \; cal/gmol =$$

$$= 82.02 \; 1 \; atm/gmol \qquad error: \; 1.65\%$$

2) Aplicando la regla de Watson:

$$\Delta Hv_{T1} = \Delta Hv_{T0} \left(\frac{1 - Tr1}{1 - Tr0} \right)^n = 82.02 \left(\frac{1 - Tr1}{1 - Tr0} \right)^n$$

con n = 0.38 tenemos:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.02	81.23	80.11	78.96	72.77	63.97	52.55	34.18	0.00
Error (%)	1.65	1.73	1.40	1.09	-0.46	-1.54	-2.87	-5.26	0.00

Calculando n mediante la ecuación (17), resulta n = 0.3165576, y tenemos:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.02	81.36	80.42	79.47	74.24	66.68	56.61	39.56	0.00
Error (%)	1.65	1.89	1.80	1.74	1.54	2.63	4.62	9.64	0.00

Calculando n mediante la ecuación (18), resulta n = 0.3606078, y tenemos:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.02	81.27	80.20	79.12	73.22	64.78	53.76	35.74	0.00
Error (%)	1.65	1.78	1.52	1.29	0.15	-0.29	-0.64	-0.94	0.00

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Por último, calculando ΔHv mediante la ecuación (19) obtenemos:

t(C°)	-161.49	-159.49	-156.71	-153.94	-140.05	-123.38	-106.72	-90.05	-82.12
ΔHv	82.02	81.33	80.34	79.31	73.46	64.71	53.01	34.72	0.00
Error (%)	1.65	1.86	1.70	1.53	0.48	-0.4	-2.04	-3.76	0.00

La suma de los errores absolutos para cada una de las series de resultados son: para la primera serie (calculada con n = 0.38) S = 16; para la segunda serie (calculada con n de la ecuación (17)) S = 25.5; para la tercera serie (calculada con n de la ecuación (18)) S = 8; por último, para la cuarta serie, obtenida mediante la ecuación (19) es S = 13.

A modo de conclusión, las técnicas que se han reseñado dan resultados con errores dentro del mismo orden de magnitud, por lo que no se puede recomendar ninguna. Si es posible resulta preferible emplear valores de exponente n de una fuente confiable en la ecuación (16) y sólo se recurrirá a estimarlo mediante las ecuaciones (18) o (17) si no queda otra salida. En tal caso se aconseja usar preferentemente la ecuación (18). Sólo si no queda otra alternativa se usará la ecuación (19).

VIII.2.6 Calor latente de vaporización de mezclas de líquidos

Se puede definir el calor latente de vaporización de una mezcla de varias formas distintas. Si la composición y la presión de equilibrio se consideran constantes en el equilibrio se dice que se trata del calor latente isobárico integral, y lo simbolizaremos $\Delta Hv_{P,X}$. En cambio si se consideran constantes la presión y temperatura en el equilibrio se lo denomina calor latente diferencial o de equilibrio y lo simbolizaremos $\Delta Hv_{P,T}$.

Como en otros casos anteriores se puede estimar el calor latente de vaporización de una mezcla asumiendo que esta es ideal, lo que implica despreciar el calor de disolución de la fase líquida y vapor, y las diferencias de entalpía debidas a cambios isotérmicos en el volumen de la fase vapor. Esto puede dar resultados aproximados (con un error del orden de ±5%) para mezclas de compuestos orgánicos pero si el soluto es una sal inorgánica o un gas soluble incondensable estas suposiciones simplificadoras no son aplicables y el error es mucho mayor.

Las ecuaciones que permiten estimar el calor latente de vaporización de acuerdo a las definiciones anteriores son las siguientes.

$$\Delta Hv_{P,X} = \sum_{i=1}^{NC} x_i \; \Delta Hv_i \qquad \textbf{(20)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\Delta Hv_{P,T} = \sum_{i=1}^{NC} y_i \ \Delta Hv_i \qquad \textbf{(21)}$$

donde x_i es la fracción molar del componente i en la fase líquida e y_i es la fracción molar del componente i en la fase vapor.

VIII. 3. MÉTODOS PARA LA ESTIMACIÓN DE LA CAPACIDAD CALORÍFICA

Ya hemos mencionado que para la estimación de la entalpía es necesario, además de la estimación del calor de vaporización (generalmente en el camino de cálculo está involucrado un cambio de fase, ya sea real o bien porque el estado de referencia implica cambios de fase en su camino hasta el estado en el cual debe realizarse el cálculo), la estimación de las capacidades caloríficas.

En este punto nos ocuparemos de la estimación de capacidad calorífica (calor específico) de gases ideales, de líquidos y de mezclas de líquidos. La capacidad calorífica de gases en condiciones no ideales se calcula a partir de la discrepancia de capacidad calorífica mediante ecuaciones de estado. Trataremos fundamentalmente los modelos aplicables a las sustancias puras.

VIII.3.1. Capacidad calorífica de gases ideales

Hay dos formas de estimar la capacidad calorífica de gas ideal. Una forma es por medio de un polinomio cúbico. En esta forma el cálculo resulta muy rápido y simple. El polinomio tiene esta estructura.

$$Cp^{\circ} = a + bT + cT^2 + dT^3 \qquad \textbf{(22)}$$

Se pueden encontrar listas de coeficientes en las referencias (Perry, 6ta. ed.) y (Reid, Prausnitz y Poling). La referencia (Yaws, Ni y Chiang, 1988) da una lista algo más extensa. La ventaja de la forma cúbica es que resulta integrable, lo que facilita los cálculos de balances de entalpía. En ciertos casos es imposible obtener la capacidad calorífica de gas ideal de un compuesto por carecer de la información necesaria, por ejemplo sus parámetros críticos o el factor acéntrico, y no parece razonable estimarlos para luego usar los valores estimados en una nueva estimación, porque se agregan peldaños innecesarios en la escalera de estimaciones lo que aumenta el error. Resulta mucho más razonable estimar las propiedades en forma directa.

Todas las técnicas de estimación de propiedades de gas ideal son métodos de contribuciones de grupo. Dado que en el estado ideal (a presión atmosférica o hasta unas 4-6 ata o bajo vacío moderado) las fuerzas intermoleculares tienen una influencia muy pequeña, los métodos de contribuciones de grupo resultan los únicos aplicables,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

y generalmente dan muy buenos resultados. La referencia (Reid, Prausnitz y Poling) presenta cuatro métodos de esta clase, de los cuales no podemos dar detalles por motivos de espacio. El más simple y general es el de Joback que no sólo permite estimar la capacidad calorífica de gas ideal sino también la entalpía de formación ΔH° y la energía libre de formación ΔG°. Otros métodos tratados en la misma referencia permiten calcular también la entropía standard S°.

Muy brevemente el método de Joback propone las siguientes ecuaciones para las distintas propiedades a 298 °K y a baja presión.

$$\Delta H_f^{\circ} = 68.29 + \sum_{i=1}^{g} n_i \, \Delta_H \qquad \Delta G_f^{\circ} = 53.88 + \sum_{i=1}^{g} n_i \, \Delta_G$$

$$Cp^{\circ} = \sum_{i=1}^{g} n_i \Delta_a - 37.93 + T\left(\sum_{i=1}^{g} n_i \Delta_b + 0.21\right) + T^2\left(\sum_{i=1}^{g} n_i \Delta c - 3.91 \; 10^{-4}\right)$$

$$+ T^3\left(\sum_{i=1}^{g} n_i \, \Delta_d + 2.06 \; 10^{-7}\right)$$

En todos los casos i es el índice de grupo y g es la cantidad total de grupos en que se puede descomponer la molécula. Para más detalles ver la referencia (Reid, Prausnitz y Poling).

Contribuciones de grupo Δ de Joback
[Kjoule/gmol.] [Joule/(gmol. °K)]

Grupo	ΔH	ΔG	Δa	Δb x 10^3	Δc x 10^4	Δd x 10^8
Incrementos no aromáticos						
$-CH_3$	-76.45	-43.96	19.5	-8.08	1.54	-9.67
$-CH_2-$	-20.64	8.42	-0.909	95.0	-0.554	1.19
>CH-	29.89	58.36	-23.0	204.0	-2.65	12.0
>C<	82.23	116.02	-66.2	427.0	-6.41	30.1
$=CH_2$	-9.63	3.77	23.6	-38.1	1.72	-10.3

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Grupo	ΔH	ΔG	Δa	Δb x 10^3	Δc x 10^4	Δd x 10^8
=CH-	37.97	48.53	-8.00	105.0	-0.963	3.56
=C<	83.99	92.36	-28.1	208.0	-3.06	14.6
=C=	142.14	136.70	27.4	-55.7	1.01	-5.02
≡CH	79.30	77.71	24.5	-27.1	1.11	-6.78
≡C-	115.51	109.82	7.87	20.1	-0.0833	0.139
Incrementos aromáticos						
$-CH_2-$	-26.80	-3.68	-6.03	85.4	-0.08	-1.80
>CH-	8.67	40.99	-20.5	162.0	-1.60	6.24
>C<	79.72	87.88	-90.9	557.0	-9.00	46.9
=CH-	2.09	11.30	-2.14	57.4	-0.0164	-1.59
=C<	46.43	54.05	-8.25	101.0	-1.42	6.78
Incrementos por halógenos						
-F	-251.92	-247.19	26.5	-91.3	1.91	-10.3
-Cl	-71.55	-64.31	33.3	-96.3	1.87	-9.96
-Br	-29.48	-38.06	28.6	-64.9	1.36	-7.45
-I	21.05	5.74	32.1	-64.1	1.26	-6.87
Incrementos por oxígeno						
-OH (alcohol)	-208.04	-189.20	25.70	-69.10	1.77	-9.88
-OH (fenol)	-221.65	-197.37	-2.81	111.00	-1.16	4.94
-O- (no arom)	-132.22	-105.00	255.00	-63.20	1.11	-5.48

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Grupo	ΔH	ΔG	Δa	Δb x 10^3	Δc x 10^4	Δd x 10^8
-O-(aromático)	-138.16	-98.22	122.00	-12.60	0.603	-3.86
>C=0 (no aromático)	-133.22	-120.50	6.45	67.00	-0.357	0.286
>C=0 (aromático)	-164.50	-126.27	304.00	-82.90	2.36	-13.10
O=CH- (aldehído)	-162.03	-143.48	309.00	-33.60	1.60	-9.88
-COOH (ácido)	-426.72	-387.87	241.00	42.70	0.804	-6.87
-COO- (éster)	-337.92	-301.95	245.00	40.20	0.402	-4.52
=O (otros)	-247.61	-250.83	6.82	19.60	0.127	-1.78
Incrementos por nitrógeno						
$-NH_2$	-22.02	14.07	26.90	-41.20	1.64	-9.76
>NH (no aromático)	53.47	89.39	-1.21	7.62	-0.486	1.05
>NH (aromático)	31.65	75.61	11.80	-23.00	1.07	-6.28
>N- (no aromático)	123.34	163.16	-31.10	227.00	-3.20	14.60
-N= (no aromático)	23.61	----	----	----	----	----
-N= (aromático)	55.52	79.93	8.83	-3.84	0.435	-2.60
=NH	93.70	119.66	5.69	-4.12	1.28	-8.88
-CN	88.43	89.22	36.50	-73.30	1.84	-10.30
$-NO_2$	-66.57	-16.83	25.90	-3.74	1.29	-8.88

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Grupo	**ΔH**	**ΔG**	**Δa**	**Δb x 10^3**	**Δc x 10^4**	**Δd x 10^8**
Incrementos por azufre						
-SH	-17.33	-22.99	35.30	-75.80	1.85	-10.30
-S- (no aromático)	41.87	33.12	19.60	-5.61	0.402	-2.76
-S-(aromático)	39.10	27.76	16.70	4.81	0.277	-2.11

Ejemplo (Tomado de Reid y col.)
Estimar la capacidad calorífica del cloroformo a baja presión y a 298.15 °K.

Datos
Constantes obtenidas de la referencia (Yaws, Ni y Chiang, 1988):
$a = 23.975$; $b = 0.18918$; $c = 1.8398\times10^{-4}$; $d = 6.6542\times10^{-8}$
El valor experimental es: Cp° = 65.73 J/(gmol °K)

Solución
1) Método de la lista de coeficientes

$$Cp^\circ = a + bT + cT^2 + dT^3 =$$
$$= 23.975 + (0.18918)298.15 + 1.8398\times10^{-4}(298.15)^2 +$$
$$+ 6.6542\times10^{-8}(298.15)^3 = 65.79 \text{ J/(gmol °K)}$$
$$\text{Error} = 0.09\%$$

2) Método de Joback

En el listado tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Grupo	**Δa**	**Δbx10³**	**Δcx10⁴**	**Δdx10⁸**
=CH-	-23.00	204.00	-2.65	12.0
-Cl	33.3	-96.3	1.87	-9.96

$$Cp^\circ = -23.00 + 3\,(33.3) - 37.93 + 298.15(0.204 - 3\ \ 0.0963 + 0.21) +$$
$$+\ 298.15^2\,(-0.000265 + 3\,(0.000187) - 3.91\ \ 10^{-4}\ ) +$$
$$+\ 298.15^3\,(1.2\ \ 10^{-7}\ \ - 3\,(9.96\ .\ 10^{-8}\,)\ + 2.06\ \ 10^{-7}\ ) = 68.45\ J/(gmol\ ^\circ K)$$

Error = 4.3%

Concluyendo, es recomendable usar los coeficientes de la ecuación cúbica siempre que ello sea posible, y sólo en último caso recurrir a los métodos de contribuciones de grupo.

VIII.3.2 Capacidad calorífica de mezclas de gases ideales

La capacidad calorífica de mezclas de gases ideales responde al modelo ideal en forma rigurosa. Así tenemos:

$$Cp_m^\circ = \sum_{i=1}^{NC} x_i\ Cp_i^\circ \qquad \textbf{(24)}$$

Si las condiciones de la mezcla son ideales (es decir los compuestos no interaccionan entre sí y la entalpía de mezcla es nula) esta relación es exacta.

VIII.3.3 Capacidad calorífica de líquidos puros

Existen tres capacidades caloríficas de líquidos que tienen interés práctico: Cp, C_σ y C_{sat}. La primera representa la variación de entalpía con la temperatura a presión constante, la segunda la variación de entalpía con la temperatura de un líquido saturado y la tercera la energía requerida para producir un cambio de temperatura en la sustancia cuando está en estado saturado. Los valores de las tres son muy parecidos entre sí en prácticamente cualquier estado, excepto en el punto crítico y nosotros no distinguiremos entre las distintas formas utilizando los términos genéricos capacidad calorífica o calor específico para referirnos a cualquiera de ellas.

La capacidad calorífica de los líquidos no depende fuertemente de la temperatura, aunque importa conocer su variación con la misma. Es prácticamente independiente de la presión.

VIII.3.3.1.Método de Rowlinson

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Se trata de una técnica de estados correspondientes. La forma de la ecuación que permite calcular el calor específico de un líquido puro es:

$$\frac{Cp - Cp^{\circ}}{R} = 2.56 + \frac{0.436}{1 - Tr} + \omega\left(2.91 + 4.28\frac{(1 - Tr)^{1/3}}{Tr} + \frac{0.296}{1 - Tr}\right) \quad \textbf{(25)}$$

donde, como es sabido: Cp° es el calor específico del gas ideal a la misma temperatura, R la constante universal de los gases, ω el factor acéntrico y Tr la temperatura reducida.

Para el caso de que la temperatura reducida sea mayor de 0.8, valor a partir del cual comienzan a aparecer diferencias entre los tres tipos de calor específico, se deben emplear relaciones específicas para calcular cada uno.

Para valores de Tr por debajo de 0.8 Cp, C_σ y C_{sat} valen prácticamente igual. El comportamiento de la ecuación anterior es muy bueno con sustancias no polares, pero empeora marcadamente con sustancias muy polares o asociadas. Por ejemplo el error medio de esta técnica para 14 sustancias distintas apolares o de baja polaridad es 2.72% en un total de 39 puntos. En este tipo de moléculas rara vez supera el 5% de error. En cambio para el etanol se obtienen errores de 84% a 208 °K, 44% a 294 °K y 4% a 383 °K.

VIII.3..3.2 Método de Missenard

Se trata de un método de contribución de grupos. En la referencia bibliográfica se tabulan los grupos y sus contribuciones a temperaturas distintas.

El método de Missenard no se debe usar para Tr > 0.75. No se recomienda el método de Missenard para compuestos con dobles enlaces.

Ejemplo 5 (Tomado de Reid y col.)
Estimar el calor específico del cis-2-buteno a 349.8 °K.

Datos
Tc = 435.6 °K w = 0.202 Cp° = 91 Joule/(gmol. °K)
Valor experimental: Cp = 139.2 Joule/(gmol. °K)

Solución
a) Aplicando la ecuación (25).

$$Tr = \frac{349.8}{435.6} = 0.803$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{Cp - Cp^{\circ}}{R} = 2.56 + \frac{0.436}{1 - 0.803} +$$

$$+ 0.202\left(2.91 + 4.28\frac{(1 - 0.803)^{1/3}}{0.803} + \frac{0.296}{1 - 0.803}\right) =$$

$$= 6.291 \rightarrow Cp = 6.291xR + Cp° = 6.291x8.314 + 91 = 143.3$$

Error = (143.3/152.7 - 1)x100 = -6.15%

Si bien el método se aplica fuera del rango recomendado de temperaturas, el error no es tan grande como cabría esperar.

A modo de comentario, se aconseja usar el método de Rowlinson para estimar el calor específico de un líquido puro no polar o ligeramente polar. Para compuestos para los que no se conoce la temperatura crítica, para compuestos polares o para alcoholes a baja temperatura ($Tr < 0.75$) usar el método de contribuciones de grupo de Missenard.

VIII.3.3.3 Capacidad calorífica de mezclas de líquidos

La estimación de calores específicos de mezclas de líquidos se puede hacer en forma aproximada asumiendo mezcla ideal. Esto por supuesto no es cierto, particularmente para los electrolitos, pero en general se obtienen estimaciones razonables por medio de la ecuación (24):

$$Cp_m = \sum_{i=1}^{NC} x_i \; Cp_i \qquad \textbf{(26)}$$

La ecuación (26) también ha sido empleada para soluciones de sólidos iónicos y no iónicos en líquidos orgánicos y en agua con buenos resultados.

Comparando valores experimentales con los calculados por la ecuación (26) para varias mezclas de todo tipo se verifican los mayores errores para soluciones acuosas de electrolitos fuertemente disociados a elevada concentración del soluto mientras las mezclas de líquidos orgánicos presentan errores menores.

El error medio de soluciones acuosas de electrolitos fuertes es del orden del 6% mientras para soluciones acuosas de sustancias orgánicas es del orden del 5%. Por último el error medio de soluciones de sustancias orgánicas es del orden del 2%.

VIII.4 DENSIDADES DE LÍQUIDOS

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nos ocuparemos aquí de mencionar algunos de los principales métodos de estimación de densidades de líquidos. No estudiaremos los métodos de estimación de densidades de gases, que suponemos perfectamente conocidos dando por sabido que se calculan a partir de ecuaciones de estado, brevemente discutidas en el Capítulo anterior.

Nos ocuparemos fundamentalmente de los métodos más exactos y que requieren menor cantidad de información. Existen dos condiciones distinguibles del estado líquido. Cuando el líquido se encuentra en presencia de su vapor (lo que significa sobre la curva de burbuja) se dice que es líquido saturado. Cuando el líquido está a mayor presión de la que le corresponde para la temperatura de ebullición o cuando está a menor temperatura de la que haría que hierva a esa presión se dice que está sobreenfriado o comprimido.

Muy a menudo se calcula para el estado saturado porque es necesario para el cálculo de propiedades de equilibrio líquido-vapor; de las propiedades del estado saturado nos interesa la densidad.

VIII.4.1 Densidades de líquidos puros

VIII.4.1.1 Densidad en el punto normal de ebullición

La densidad en el punto normal de ebullición es una variable usada por algunos métodos de estimación de otras propiedades, lo que hace que tenga interés práctico determinar o estimar su valor. Si bien es cierto que en la mayoría de los casos la determinación experimental de la densidad de líquidos en el punto normal de ebullición no plantea dificultades técnicas insuperables, a veces esta resulta incómoda por diversos motivos: peligrosidad, toxicidad o posible descomposición del producto, lo que hace atractiva la estimación de su valor.

El método de Tyn y Calus ha demostrado ser suficientemente exacto y se puede utilizar con confianza.

$$1/\rho_b = Vb = 0.285 Vc^{1.048} \qquad \textbf{(27)}$$

donde: ρ_b es la densidad molar en el punto normal de ebullición [gmol/cm^3];
Vb es el volumen molar en el punto normal de ebullición [cm^3 /gmol];
Vc es el volumen crítico [cm^3 /gmol].

El error promedio encontrado por esta técnica sobre 32 compuestos entre los que se encuentran sustancias no polares, polares y asociativas, es sólo del 2%, con mayor error en las sustancias fuertemente disociadas, iónicas y con puente de hidrógeno. Por ejemplo, el ácido clorhídrico tiene un error de -6.8% mientras el benceno tiene un error de -0.1%.

Ejemplo (Tomado de Reid y col.)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Estimar el volumen molar del clorobenceno en su punto normal de ebullición.

Datos

$Vc = 308\ cm^3/gmol$

Solución

$Vb = 0.285Vc^{1.048} = 0.285x308^{1.048} = 115.6\ cm^3/gmol$

Puesto que el valor experimental es 115 cm^3 /gmol, el error es de 0.5%.

VIII.4.1.2 Correlación de Hankinson y Thomson

Esta correlación permite calcular la densidad del líquido saturado y del líquido sobreenfriado. Es un trabajo basado en más de 4500 datos recopilados de la literatura y sometidos a un proceso de análisis para detectar los posibles errores experimentales, recalculando en algunos casos los valores publicados de factor acéntrico y de Z_{Ra} , que se pueden encontrar en la referencia (Reid, Prausnitz y Poling) en un listado correspondiente a 190 compuestos comunes. La ecuación es la siguiente.

$$\frac{V_s}{V^*} = V_R^* \ (1 - \omega_{srk}\ V_R^{\delta}) \qquad \textbf{(28)}$$

donde: Vs es el volumen de líquido saturado [cm^3/gmol]; V* es un "volumen característico" cuyo valor es parecido al volumen crítico, generalmente mayor, listado en la referencia (Reid, Prausnitz y Poling). Si no aparece en la lista se puede estimar por medio de la ecuación (29) [cm^3 /gmol]; ω_{srk} es el factor acéntrico de la ecuación S-R-K, también listado en la referencia (Reid, Prausnitz y Poling); $V_R°$ y V_R^{δ} son dos variables que calculan las ecuaciones (30) y (31).

$$V^* = \frac{R\ Tc}{Pc}\ (a' + b'\omega_{srk} + c'\omega_{srk}^2) \qquad \textbf{(29)}$$

a' = 0.2851686 b' = -0.0637911 c' = 0.01379173

Estos valores de a', b' y c' son valores medios válidos para todos los hidrocarburos. Para mayor exactitud se recomienda usar valores listados en la referencia (Reid, Prausnitz y Poling) donde se discriminan valores por clase de hidrocarburo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$V_R^* = 1 + a(1 - Tr)^{1/3} + b(1 - Tr)^{2/3} + c(1 - Tr) + d(1 - Tr)^{4/3} \qquad \textbf{(30)}$$

(Validez: 0.25 < Tr < 0.95)

$$V_R^\delta = \frac{e + f\ Tr + g\ Tr^2 + h\ Tr^3}{Tr - 1.00001} \qquad \textbf{(31)}$$

donde: a = -1.52816 b = 1.43907 c = -0.81466 d = 0.190454
e = -0.296123 f = 0.386914 g = -0.0427258 h = -0.480645

Para líquidos sobreenfriados o comprimidos tenemos la siguiente ecuación, que es una forma modificada de la ecuación de Tait (1888).

$$V = Vs\left(1 - C \ln \frac{B + P}{B + Ps}\right) \qquad \textbf{(32)}$$

donde Vs es el volumen de líquido saturado (ecuación (28)) y B se obtiene de:

$$B = Pc\left[a(1 - Tr)^{1/3} + b(1 - Tr)^{2/3} + d(1 - Tr) + e_1(1 - Tr)^{4/3} - 1\right] \qquad \textbf{(33)}$$

$$C = j + k\ \omega_{srk} \qquad \textbf{(34)}$$

donde:

$e_1 = \exp(f + g\ \omega_{srk} + h\ \omega^2_{srk})$

a = -9.070217 b = 62.45326 d = -135.1102 f = 4.79594
g = 0.250047 h = 1.14188 j = 0.0861488 k = 0.0344483

La presión de saturación Ps se puede obtener de la siguiente ecuación:

$$\log_{10} Pr = Pr^0 + \omega_{srk}\ Pr^1 \qquad \textbf{(35)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$Pr^0 = 5.8031817 \log_{10}(Tr) + 0.07608141 \left[35 - \frac{36}{Tr} - 96.736 \log_{10}(Tr) + Tr^6\right]$$

$$Pr^1 = 4.86601\left(\log_{10}(Tr) + 0.03721754 \left[35 - \frac{36}{Tr} - 96.736 \log_{10}(Tr) + Tr^6\right]\right)$$

VIII.4.1.3 Método de Rackett modificado

El método de Rackett modificado por Spencer y Danner da el volumen para líquido saturado. Dado que las diferencias con el estado comprimido generalmente son importantes, no se recomienda usarla para el estado comprimido.

$$V_s = \frac{1}{\rho_s} = \frac{R\ Tc}{Pc} Z_{Ra}^{(1+(1-Tr)^{2/7})} \qquad \textbf{(36)}$$

donde Z_{Ra} es el coeficiente de compresibilidad cuyos valores podemos encontrar en la referencia (Reid, Prausnitz y Poling), y son parecidos al Zc. Si no se cuenta con valores confiables de Z_{Ra} se puede usar Zc en su lugar, pero la exactitud es menor, pues los valores de Z_{Ra} oscilan entre un 5% en exceso a 1% en defecto respecto a los valores de Zc. También se puede estimar a partir del factor acéntrico.

$$Z_{Ra} = 0.29056 - 0.0877\omega \qquad \textbf{(37)}$$

Interpolación por un punto

La ecuación de Rackett o su versión modificada se puede usar conociendo un valor experimental confiable a una temperatura para predecir las densidades a otras temperaturas distintas. Supongamos conocer V_1 a T_1 ; por la ecuación (36):

$$V_{s1} = \frac{R\ Tc}{Pc} Z_{Ra}^{(1+(1-Tr1)^{2/7})} \qquad \textbf{(38)}$$

$$V_s = \frac{R\ Tc}{Pc} Z_{Ra}^{(1+(1-Tr1)^{2/7})} \qquad \textbf{(39)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de donde:

En forma similar se puede describir la densidad de forma análoga a la (37).

$$\frac{V_s}{V_{s1}} = Z_{Ra}^{1+(1-Tr)^{2/7}-[1+(1-Tr1)^{2/7}]} = Z_{Ra}^{((1-Tr)^{2/7}-(1-Tr1)^{2/7})} \qquad \textbf{(40)}$$

$$V_s = V_{s1}\ Z_{Ra}^{((1-Tr)^{2/7}-(1-Tr1)^{2/7})} \qquad \textbf{(41)}$$

La forma siguiente se ha correlacionado para 700 compuestos orgánicos (Yaws y col, 1991):

$$\rho = \frac{A}{B^{(1-Tr)^{2/7}}} \qquad \textbf{(42)}$$

donde: ρ es la densidad a la temperatura reducida Tr [g/cm^3]. Esta es otra forma modificada de la ecuación de Rackett, en la que B = Zc y:

$$A = \rho\ B^{(1-Tr)^{2/7}} \qquad \textbf{(43)}$$

Esta ecuación sirve sobre todo para evaluar la densidad en el estado comprimido, pero también proporciona valores de densidad de líquido saturado si se emplea la temperatura reducida de saturación.

Para estimar la densidad del líquido saturado se usa la correlación de Rackett modificada o la correlación de Hankinson y Thomson. Para estimar la densidad de líquido sobre enfriado es conveniente usar la interpolación de un punto.

VIII.4.2. Densidades de mezclas de líquidos

El estado líquido aún no es tan conocido como el gaseoso. No existe un tratamiento simple y uniforme para la multiplicidad de fenómenos asociativos y coligativos que ocurren en mezclas líquidas. Se han hecho algunos intentos más o menos exitosos para describir las propiedades de las mezclas de líquidos mediante las reglas de mezclado que damos a continuación.

A) Reglas de Chueh y Prausnitz: (Prausnitz y Chueh)

$$Tc_m = \sum_{i=1}^{NC} \sum_{j=1}^{NC} \varphi_i \; \varphi_j \; Tc_{ij} \quad , \quad Tc_{ij} = k_{ij} \left(Tc_i \; Tc_j \right)^{1/2} \qquad \textbf{(44)}$$

$$\varphi_i = \frac{x_i \; Vc_i}{\sum_{i=1}^{NC} x_i \; Vc_i} \qquad \varphi_j = \frac{x_j \; Vc_j}{\sum_{j=1}^{NC} x_j \; Vc_j} \qquad \textbf{(45)}$$

$$k_{ij} = 1 - \frac{8 \left(Vc_i \; Vc_j \right)^{1/2}}{\left(Vc_i^{1/3} \; Vc_j^{1/3} \right)^{3}} \qquad \textbf{(46)}$$

Estas reglas se han recomendado como especialmente adecuadas para la ecuación de Rackett modificada. Esta queda expresada de la siguiente forma.

$$V_{ms} = \frac{1}{\rho_{ms}} = R \; Z_{Ram}^{[1+(1-Tr)^{2/7}]} \sum_{i=1}^{NC} \left(y_i \; \frac{Tci}{Pci} \right) \qquad \textbf{(47)}$$

donde:

$$Tr = \frac{T}{Tc_m} \qquad Z_{Ram} = \sum_{i=1}^{NC} x_i \; Z_{Rai} \qquad \textbf{(48)}$$

VIII.5 ESTIMACIÓN DE PROPIEDADES TERMODINÁMICA DE TRANSPORTE

A continuación, habiendo tratado someramente los métodos para la estimación de entalpías y propiedades relacionadas, se analizarán brevemente, según se comentó en la introducción, algunos de los métodos propuestos para la estimación de propiedades de transporte. Esta sección es sólo para dar una idea al respecto, ya que la cantidad de métodos propuestos para cada propiedad, y el número de las mismas, hace prohibitivo cualquier análisis en profundidad.

La diferencia fundamental entre estas y las propiedades de equilibrio o las

P-V-T que tratamos anteriormente consiste en que las propiedades de transporte están relacionadas con el transporte de masa, energía y cantidad de movimiento y no son propiedades de equilibrio macroscópico.

Existe otra diferencia importante: las propiedades de transporte, como alguna de las de equilibrio, son más difíciles de medir exactamente que las P-V-T. Por ejemplo, parece haber consenso en las distintas fuentes que las variaciones en los datos experimentales de conductividad térmica publicados hasta ahora está en el orden del 5-10%. Por lo tanto, cuando se afirma que el "error" de un cierto método de estimación de conductividad térmica es de un cierto orden, se hace esta afirmación en base a la comparación de valores calculados por ese método con valores experimentales. De modo que si el "error" está en el mismo orden que las variaciones de los datos experimentales podemos afirmar que sus resultados son tan buenos como un valor experimental. Ahora, ¿qué pasa en el caso de que el error sea menor?. ¿Podemos afirmar que el resultado es "mejor que un dato experimental"?. ¡Por supuesto que no!. A lo sumo podemos decir que es tan bueno como un dato experimental, o más exactamente que tiene una exactitud del mismo orden que la dispersión de los datos experimentales. Puesto que en la práctica los fenómenos de transporte casi nunca se presentan aislados, la estimación de propiedades de transporte en forma conjunta con las propiedades de equilibrio y las propiedades P-V-T en general se plantea como una necesidad ineludible en la simulación estática o dinámica de procesos industriales.

VIII.5.1. Viscosidad

En este punto nos ocuparemos de la estimación de viscosidad de gases y líquidos así como de sus mezclas. Trataremos fundamentalmente los modelos aplicables a las sustancias puras y algunas sustancias de composición constante como los cortes de petróleo.

VIII.5.1.1 Viscosidad de gases

No nos detendremos en la enunciación y mucho menos en el estudio de la teoría de la transferencia de cantidad de movimiento, dando por conocidas las bases de la teoría cinética de las propiedades de transporte. Primero trataremos la viscosidad de gases puros a baja presión, luego la de gases densos y por último la viscosidad de mezclas de gases.

Viscosidad de gases puros a baja presión

La viscosidad de gases puros a presiones bajas o moderadas se puede estimar por medio de varios métodos. Se destacan dos de ellos: el método de Chung y el método de estados correspondientes de Reichenberg.

Se puede usar cualquiera de los dos métodos para estimar la viscosidad de gases puros a baja presión, con errores del orden de 0.5 a 1.5% para gases no polares y de 2 a 4% para gases polares. El método de Chung requiere un poco más

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

información que el de Reichenberg (ver bibliografía recomendada al final del Capítulo).

Viscosidad de mezclas de gases a baja presión

A baja presión sigue siendo válida la teoría cinética de Chapman-Enskog. Los métodos para estimar la viscosidad de mezclas de gases a baja presión son básicamente interpolativos, esto es, requieren conocer las viscosidades de sus componentes. El método de Reichenberg es el más complicado pero también bastante más exacto. Incorpora elementos de la teoría cinética de Hirschfelder Curtiss y Bird. El método de Wilke es más simple pero menos exacto y requiere menos información. Las reglas de mezclado de Chung en cambio exigen conocer las viscosidades de los componentes puros pero da resultados más pobres que los métodos anteriores.

En síntesis, para evaluar la viscosidad de una mezcla de gases a baja presión disponemos principalmente de dos métodos. El método de Reichenberg es más complejo que el de Wilke, pero proporciona resultados algo más exactos en forma consistente.

Viscosidad de gases puros a alta presión

La viscosidad depende fuertemente de la presión cerca del punto crítico y a una temperatura reducida de alrededor de 1 a 2 a presiones altas. A temperaturas reducidas muy altas la viscosidad en cambio es casi independiente de la presión.

Esto es posible explicarlo mediante la teoría de Enskog de los gases densos. Esta se basa en la suposición de que el gas consiste en esferas densas y rígidas que se comportan como un sistema de baja densidad de esferas rígidas.

La teoría de gas denso de Enskog no es capaz de predecir satisfactoriamente la viscosidad, pero suministra una base teórica sobre la que se han construido varias correlaciones que permiten estimarla razonablemente bien.

Se han publicado muchos métodos de los cuales el de Chung debe mencionarse por su relativa simplicidad y por su exactitud. Esta es una extensión del método usado para la estimación de viscosidad a bajas presiones. Tiene la ventaja de que tiene embebido el cálculo de viscosidad a baja presión por lo que no requiere ningún valor de viscosidad.

Viscosidad de mezclas de gases a alta presión

La viscosidad de mezclas de gases a alta presión se puede calcular por medio de la técnica de Chung ya mencionada para el caso de gases puros a alta presión combinada con la técnica de Wilke para mezclas de gases a baja presión.

VIII.5.1.2 Viscosidad de líquidos

La estimación de viscosidades en el estado líquido no tiene absolutamente nada que ver, ni teórica ni prácticamente, con los métodos usados para gases. La

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

viscosidad de líquido es varias veces superior a la de gas. Esta diferencia se debe a las fuertes interacciones entre partículas que se pueden presentar con mayor facilidad en el estado líquido, de modo que la no idealidad del líquido debida a la polaridad o puente de hidrógeno influye fuertemente en la viscosidad.

En la práctica de la ingeniería a menudo estamos más interesados en la viscosidad cinemática que en la dinámica. Si se grafica el log(ν) en función de la temperatura se obtiene una línea prácticamente recta tanto para el estado líquido como para el vapor. Esto ha llevado a muchos investigadores a correlacionar la viscosidad cinemática con la temperatura en varias formas, de las que existen tablas muy completas.

Efecto de la temperatura en la viscosidad de líquido

Para la mayoría de los líquidos la viscosidad decrece con la temperatura. Son excepciones unas pocas sustancias, notablemente los aceites lubricantes sintéticos en los que conviene que la viscosidad sea pequeña a baja temperatura para que el motor (que arranca siempre frío) no tenga tanta resistencia pero a medida que se calienta es necesario que la viscosidad aumente para producir una mejor lubricación.

La función que mejor describe la variación de la viscosidad de los líquidos con la temperatura es la siguiente.

$$\ln \mu = A + \frac{B}{T} \qquad \textbf{(49)}$$

Esta forma, comúnmente llamada ecuación de Andrade, representa muy bien el comportamiento de la mayoría de los líquidos. Otra ecuación que a veces se emplea para este fin es la siguiente.

$$\mu = A\ T_B \qquad \textbf{(50)}$$

Una variante de la ecuación de Andrade se conoce como ecuación de Vogel.

$$\ln \mu = A + \frac{B}{C + T} \qquad \textbf{(51)}$$

Por último también es muy usada la siguiente ecuación.

$$\ln \mu = A + \frac{B}{T} + C\ T + D\ T^2 \qquad \textbf{(52)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En la referencia (Reid, Prausnitz y Poling) hay una extensa tabla de constantes A, B, C y D para las ecuaciones (49), (50), (51) y (52).

Viscosidad de líquidos a baja temperatura

Cuando no se conocen las constantes de las ecuaciones anteriores no queda otra salida que hacer una estimación por medio de alguno de los métodos disponibles. Los errores que se pueden esperar son grandes y variables. Ninguna de las técnicas publicadas hasta ahora es totalmente satisfactoria por uno u otro motivo, y de ellas se pueden mencionar las de Orrick y Erbar y la de Thomas. No porque resulten claramente superiores a las otras, sino porque son más sencillas y requieren menos información. El método de Orrick y Erbar es un método de contribuciones de grupo, con un error promedio del 15%, mientras que el método de Thomas es un método de contribuciones de grupo similar al anterior. Proporciona la viscosidad de líquido saturado de sustancias no polares y no asociadas. El método de Thomas no se puede usar en líquidos fuertemente polares o que tengan puente de H, por ejemplo alcoholes.

Siempre que sea posible se deben preferir los valores estimados mediante las ecuaciones (49) a (52) antes que cualquier valor estimado por otros métodos, porque las constantes de las mismas han sido obtenidas a partir de una gran cantidad de valores experimentales. Si esto no es posible puede usarse el método de Orrick y Erbar para alcoholes y ácidos, o el método de Thomas para otras sustancias.

Viscosidad de líquidos a alta temperatura

Las correlaciones para baja temperatura asumen que la viscosidad es una función lineal de la inversa de la temperatura absoluta. Esto es más o menos cierto hasta Tr = 0.7 pero por encima de este límite deja de serlo. Desde este valor hasta el punto crítico (zona de alta temperatura) los modelos que mejor describen la viscosidad de líquido son del tipo de estados correspondientes, por ejemplo la técnica de Letsou y Stiel, válida solo para líquidos saturados.

Efecto de la presión en la viscosidad de líquido

La viscosidad de los líquidos por debajo del punto de ebullición normal no resulta particularmente sensible a la presión, pero a presiones muy altas se han observado aumentos muy grandes. Parece una regla general el hecho de que cuanto más compleja sea la estructura molecular tanto mayor resultará el efecto de la presión.

El aumento de presión aumenta bastante la viscosidad de un líquido. Este aumento se puede estimar a partir de la siguiente ecuación en la que la viscosidad a alta presión se refiere a la del líquido saturado a la misma temperatura.

$$\frac{\mu}{\mu_s} = \frac{1 + D(\Delta Psr/2.118)^A}{1 + \omega\ C\ \Delta Psr} \qquad \textbf{(53)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde: μ es la viscosidad del líquido a la presión P y temperatura T [Centi Poises];
μ_s es la viscosidad del líquido saturado a la presión Pv y temperatura T;
A es un parámetro dado por la ecuación (54);
Δp_{sr} es la diferencia reducida de presiones dada por la ecuación (55);
C es un parámetro dado por la ecuación (56);
D es un parámetro dado por la ecuación (57);
ω es el factor acéntrico;

$$A = 0.9991 - \frac{4.674\ 10^{-4}}{1.0523/Tr^{0.03877} - 1.0513} \qquad \textbf{(54)}$$

$$\Delta Psr = \frac{P - Pv}{Pc} \qquad \textbf{(55)}$$

$$C = -0.07921 + 2.1616\ Tr - 13.404\ Tr^2 + 44.1706\ Tr^3 - 84.8291\ Tr^4 + 96.1209\ Tr^5 - 59.8127\ Tr^6 + 15.6719\ Tr^7 \qquad \textbf{(56)}$$

$$D = \frac{0.3257}{\left(1.0039 - Tr^{2.573}\right)^{0.2906}} - 0.2086 \qquad \textbf{(57)}$$

Lucas comprobó la exactitud de este modelo para 55 líquidos polares y no polares, encontrando un error menor del 10%. No resulta fácil evaluar el grado de exactitud de esta y otras correlaciones por la falta de datos experimentales de viscosidad de líquidos a presiones elevadas, debido a las dificultades que presenta su medición.

Viscosidad de mezclas de líquidos

Existen dos tipos de situación posible cuando se debe estimar la viscosidad de mezclas de líquidos. O bien no se conocen o no es posible estimar las viscosidades de los componentes de la mezcla en esas condiciones, o bien se conocen o se pueden estimar con exactitud. El primer caso es el más difícil de resolver y por suerte se presenta en la práctica con menor frecuencia. En el segundo caso existen muchos modelos simples, confiables y relativamente exactos que permiten simular el problema.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

No se conocen las viscosidades de los componentes

En este caso sólo existen modelos para temperaturas que se encuentran por debajo o ligeramente por encima del punto normal de ebullición de sus componentes. Es decir, están restringidos a temperaturas reducidas de sus componentes menores que 0.7 aproximadamente. La razón es que, como ya se ha sugerido, para temperaturas menores de Tr = 0.7 la viscosidad es muy sensible a la estructura química de los componentes; la polaridad y los efectos asociativos pueden afectar significativamente a la viscosidad. Esta es la causa de que la viscosidad cinemática sea menos sensible a la composición que la viscosidad dinámica porque al dividir por la densidad en cierto modo se compensan los efectos polares y asociativos, que actúan de forma parecida en ambas.

El método de Teja y Rice, se trata de una técnica basada en el teorema de los estados correspondientes, y es un procedimiento parcialmente interpolativo, en el que se necesitan las viscosidades de los integrantes de la mezcla a una temperatura diferente de la de la mezcla. Tiene una estructura similar a la de las correlaciones de dos fluidos de referencia, como la de la ecuación de Lee-Kesler.

Se conocen las viscosidades de los componentes

Se pueden distinguir dos situaciones diferentes. En el primer caso se mezclan especies que no interaccionan entre sí, como es el caso de los hidrocarburos.

Como la mezcla es ideal, podemos asumir que la viscosidad es aditiva. Entonces se podrá calcular la viscosidad de la mezcla mediante cualquier regla ideal de aditividad de propiedades.

En el segundo caso las especies presentes interactúan mutuamente de alguna manera. Si la intensidad de la interacción es pequeña o moderada, todavía es posible aplicar reglas ideales con cierto grado de éxito. Si la interacción es fuerte se hace necesario emplear parámetros de interacción obtenidos a partir de datos experimentales que corrijan las reglas ideales para tomar en cuenta la no idealidad, o tomar alguna otra medida correctiva.

Si no se cuenta con datos experimentales y no se corrige para tomar en cuenta la no idealidad de la mezcla, la exactitud de las reglas ideales es muy cuestionable, y probablemente sus resultados estarán muy alejados de la realidad. Por ejemplo se puede usar el método de Grunberg-Nissan (Reid, Prausnitz y Poling).

En muchos casos de interés práctico como el de las mezclas de hidrocarburos se pueden aplicar reglas ideales con resultados razonablemente satisfactorios. Se han sugerido muchas ecuaciones para estimar la viscosidad de mezclas ideales de líquidos entre las que podemos mencionar la de Wilke. Un enfoque alternativo más exacto se debe a Lobe.

El método de Lobe da resultados consistentemente mejores y si bien ninguno de los dos es demasiado exacto es probable que proporcione resultados satisfactorios en la mayoría de los casos. Se aconseja usar el método de Lobe si se dispone de valores experimentales de las densidades individuales y de la mezcla.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

VIII.5.2 Conductividad térmica de gases a baja presión

La teoría de la conductividad térmica está bastante desarrollada a partir del trabajo de Eucken. Sin entrar en detalles, haremos un esbozo a grandes rasgos de las lineas generales de esta teoría porque si bien no tiene mucho valor práctico debido a las dificultades que surgen para evaluar algunas de sus variables, proporciona una base sobre la que se fundamentan muchos métodos prácticos.

Esencialmente Eucken expresa el llamado factor de Eucken en función de la energía molecular, distinguiendo entre las dos contribuciones fundamentales a dicha energía: interna y traslacional. La energía interna está relacionada con la temperatura del gas mientras la energía traslacional depende de la velocidad de las moléculas y por lo tanto está relacionada con la temperatura y la presión.

Método de Eucken

Para gases monoatómicos la teoría de Eucken proporciona la siguiente ecuación.

$$\frac{k\ M}{\mu\ Cv} = 1 + \frac{9/4}{Cp/R - 1} \qquad \textbf{(58)}$$

Esta ecuación asume moléculas que no interaccionan entre sí y por lo tanto sólo resulta aplicable a gases no polares.

Como el objetivo de la estimación de k es muy a menudo aplicarla al cálculo del número de Prandtl, resulta interesante acotar que se puede deducir en forma directa una expresión para calcularlo de la ecuación de Eucken. El número de Prandtl es importante para estimar coeficientes de transmisión de calor por conducción y convección. Para los gases el número de Prandtl es prácticamente independiente de la temperatura porque tanto Cp como μ y k aumentan con la temperatura del mismo modo, o casi. También es casi independiente de la presión, para presiones bajas y moderadas. Esto permite hacer estimaciones muy rápidas de conductividad térmica.

$$N_{Pr} = \frac{Cp\ \mu}{k} \qquad \textbf{(59)}$$

Observe que para obtener k a partir del número de Eucken es preciso estimar μ y Cv, que es función de Cp. Es la misma información que se necesita para estimar k a partir del número de Prandtl.

En la teoría de Eucken para gases a baja densidad es posible obtener la siguiente fórmula que permite calcular el número de Prandtl para cualquier temperatura y a baja presión, partiendo de datos experimentales o estimados de Cp° a la misma temperatura.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$N_{Pr} = \frac{Cp^{\circ}}{Cp^{\circ} + 2.48} \qquad \textbf{(60)}$$

También se puede emplear la siguiente fórmula:

$$N_{Pr} = \frac{4}{9 - \frac{5}{\gamma}} \qquad \textbf{(61)}$$

Cualquiera de las dos fórmulas da resultados coincidentes con los experimentales para gases "ideales" como aire, N_2 u O_2 pero sus resultados difieren algo para gases polares o asociados (NH_3 , vapor de H_2O, etc).

Se puede esperar que este valor no varíe mucho con un aumento moderado de presión. Para gases polares es preferible adoptar un valor de $N_{Pr} = 0.86$ ya que no responden a la teoría de Eucken, que idealiza moléculas al considerarlas no polares. Para gases puros a alta presión esta fórmula es poco confiable, y es preferible estimar por separado cada componente del N_{Pr} y calcularlo a partir de los valores individuales, dado que en particular para moléculas complejas es difícil la estimación porque el Cp varía mucho más que los otros con la presión. Igual procedimiento se debe adoptar para mezclas de gases, estimando cada propiedad para la mezcla y luego a partir de ellas el N_{Pr}.

En la práctica el cálculo de la conductividad térmica de gases puros o mezclas a baja presión no se hace por medio de la teoría de Eucken, a menos que se quiera una estimación solo aproximada. Los métodos de predicción de Roy-Thodos, Chung y Ely-Hanley son un poco más exactos aunque mucho más complejos. No obstante a veces tienen un error mayor que la ecuación de Eucken (Reid, Prausnitz y Poling).

Con la excepción del de Roy-Thodos, los métodos de predicción de conductividad térmica de gases puros a presión ambiente se basan en ecuaciones que ponen el factor de Eucken en función de alguna variable como Cv, ω o Tr. Por lo tanto se necesitan conocer valores independientes de μ y Cv. El método de Eucken tiende a proporcionar valores demasiado bajos, mientras el método de Chung produce valores algo mayores que los experimentales pero con poco error para gases no polares, aunque tiende a errores mayores para gases polares. Se aconseja usar el método de Chung o el de Eucken para gases no polares y el de Roy-Thodos de contribuciones de grupo para gases orgánicos polares (Reid, Prausnitz y Poling).

Efecto de la temperatura en la conductividad térmica de gases a baja presión

El ajuste de datos experimentales de conductividad térmica de gases a presiones normales muestra que un polinomio de tercer grado resulta satisfactorio.

$$k = a + bT + cT^2 + dT^3 \qquad \textbf{(62)}$$

En la referencia (Reid, Prausnitz y Poling) se listan valores de los coeficientes para muchos gases.

Efecto de la presión en la conductividad térmica de los gases

A baja presión el coeficiente de conductividad térmica de los gases mono y poliatómicos se puede considerar constante, ya que varía muy poco con la presión. En rigor varía en forma casi lineal, pero con una pendiente muy pequeña. Esto no es así para presiones mayores de 50 bar, incluso a temperaturas elevadas. En las cercanías del punto crítico las variaciones son particularmente bruscas.

Los procedimientos de estimación más usuales emplean el principio de los estados correspondientes. La forma general de los mismos es la siguiente.

$$k - k^{\circ} = f(\rho) \qquad \textbf{(63)}$$

donde: k es la conductividad térmica a presión elevada, k° es la conductividad térmica a baja presión y ρ es la densidad.

También puede utilizarse el método de Stiel y Thodos o el de Chung. No se puede aconsejar el uso de una u otra técnica basándose en la exactitud, ya que es similar. El método de S-T exige conocer la conductividad a baja presión mientras el método de Chung no la necesita porque la calcula. Ninguno de los métodos es aplicable a sustancias polares, y aun para sustancias no polares el error puede ser grande.

VIII.5.3 Conductividad térmica de mezclas de gases a baja presión

La conductividad térmica normalmente no es una función lineal de la fracción molar. Esto elimina de plano las técnicas basadas en las reglas de mezclado ideal.

Cuanto mayor diferencia hay en tamaño y/o peso de los componentes tanto mayor es la discrepancia respecto de la idealidad. Por eso todas las técnicas disponibles son de naturaleza empírica, por ejemplo, el método de Wassiljewa, Mason y Saxena. El método de Wassiljewa tiene una gran similitud con el método de Wilke para estimar viscosidad de mezclas de gases.

Conductividad térmica de mezclas de gases a alta presión

No hay muchos datos disponibles de conductividades térmicas de mezclas

de gases a alta presión. Para estimarla se puede usar el método de Stiel-Thodos para mezclas de gases no polares.

VIII.5.4 Conductividad térmica de líquidos

Como ya se dijo antes, la teoría cinética de los líquidos está muy lejos de tener el éxito que ha tenido en su aplicación a los gases. Es un hecho que todos los métodos de predicción de propiedades que conocemos hasta ahora son de naturaleza empírica, lo que demuestra que todavía no se comprende totalmente el estado líquido. Es evidente que existe una diferencia cualitativa fundamental en el comportamiento de las moléculas en ambos estados. En el estado gaseoso las moléculas tienen relativa libertad de movimiento y los campos de fuerzas intermoleculares tienen una influencia menor en su comportamiento que en el estado líquido. Como consecuencia, la viscosidad y la conductividad térmica son mucho mayores en los líquidos que en los gases.

Es posible estimar en forma aproximada la conductividad térmica de líquidos mediamte el número de Prandtl. Una ecuación que permite estimarlo de un modo solo aproximado (con errores medios de 19% y máximos de hasta 100%) es la siguiente.

$$\log_{10}\,(N_{Pr}) = 0.113\,\frac{\Delta Hv}{T} - 1.8 \qquad \textbf{(64)}$$

donde: ΔHv es el calor latente de vaporización [cal/gmol];
T es la temperatura [°K].

La (64) es válida para el intervalo de temperaturas -50 < T < 100 °C y sólo para líquidos con peso molecular < 150.

Efecto de la temperatura en la conductividad térmica de líquidos

La conductividad térmica de los líquidos disminuye con la temperatura, con la excepción del agua, las soluciones acuosas y algunas moléculas que tienen varios grupos hidroxilo y/o amina. Los datos experimentales se pueden describir bien mediante un polinomio cúbico. En la referencia (Reid, Prausnitz y Poling) se tabulan estas constantes para varios líquidos comunes.

Conductividad térmica de líquidos a baja presión

La conductividad térmica de los líquidos puros por debajo del punto de ebullición está en su mayoría en el entorno desde 0.1 a 0.17 W/(m °K). Por ser un intervalo muy estrecho resulta más fácil encontrar relaciones empíricas que permitan calcularla. Dos métodos conocidos para ello son el de Latini y el de Sato-Riedel. El error del método de Latini varía pero normalmente es menor del 10%, y no es aplicable en compuestos polares. El método de Sato y Riedel (también llamado del punto de ebullición) calcula la conductividad térmica a la temperatura normal de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ebullición y luego corrige ese valor a otra temperatura. La ecuación para calcularla en el punto normal de ebullición es la de Sato.

$$k_b = \frac{1.11}{\sqrt{M}} \qquad \textbf{(65)}$$

Luego, para calcular el valor de k a otra temperatura usamos la ecuación de Riedel. Combinando ambas resulta la siguiente ecuación.

$$k = \frac{1.11}{\sqrt{M}} \frac{3 + 20(1 - Tr)^{2/3}}{3 + 20(1 - Tbr)^{2/3}} \qquad \textbf{(66)}$$

Los errores varían ampliamente, siendo mayores para hidrocarburos de bajo peso molecular y de cadena ramificada. Generalmente el valor estimado resulta menor que el experimental. No funciona en compuestos polares.

Los métodos de Latini y de Sato-Riedel tienen más o menos la misma exactitud. Se aconseja usar cualquiera de ambos para líquidos orgánicos por debajo de la temperatura de ebullición. Cabe esperar en este caso errores máximos por debajo del 15%. Si el líquido no es polar y la temperatura reducida es mayor de 0.9 aproximadamente se aconseja usar alguno de los métodos para líquidos a presiones elevadas que se discuten a continuación. Se aconseja usar la correlación de Sastri y Rao para líquidos polares siempre que $Tr \leq 0.9$. No se conoce ninguna correlación confiahle para líquidos polares a $Tr > 0.95$.

Efecto de la presión en la conductividad térmica de los líquidos

Normalmente el efecto es despreciable, hasta presiones del orden de 50 a 60 bar, excepto en las cercanías del punto crítico, donde el líquido se comporta de modo anómalo. Se han propuesto varias correlaciones entre las que podemos citar los métodos de Missenard y Latini. Ambas son válidas para líquidos polares y no polares.

Ambos métodos dan errores similares y comparativamente bajos. Se puede emplear cualquiera de ellos con confianza. El método de Missenard es más general, mientras el de Latini está limitado a hidrocarburos.

Conductividad térmica de mezclas de líquidos

Para mezclas de hidrocarburos la regla de mezcla ideal da excelentes resultados

$$k_m = \sum_{i=1}^{NC} x_i \, k_i \qquad \textbf{(67)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Además, se pueden estimar las conductividades térmicas de mezclas líquidas a las temperaturas y presiones habituales en la industria mediante dos de los muchos métodos publicados hasta ahora. Las estimaciones son un poco menores a los valores experimentales pero el error no es muy grande. Estos métodos son los de Filippov y de Li. Ambos métodos son comparables en exactitud. El método de Li tiene la ventaja de permitir la estimación de la conductividad térmica de mezclas multicomponentes, pero exige conocer los volumenes de líquido puro y las fracciones molares de todos los componentes. El método de Filippov es el recomendado para mezclas binarias (ver Reid, Prausnitz y Poling).

VIII.5.5. Coeficiente de difusión

El término coeficiente de difusión o difusividad se suele emplear en la literatura como una medida de la tasa de transferencia de masa en ausencia de mezcla, ya sea mecánica o convectiva. En realidad, el fenómeno se produce inducido por varias causas. Se puede producir por el efecto de gradientes de presión (lo que llamaremos difusión por presión). También puede resultar de la existencia en la fase de gradientes de temperatura (difusión térmica), de la existencia de gradientes de concentración y por último se puede producir por la acción de otras fuerzas externas (difusión forzada).

Estimación mediante correlaciones empíricas

Para sistemas gaseosos, si bien las predicciones obtenidas a partir de la teoría de Chapman-Enskog son bastante exactas para muchos sistemas, en algunos casos proporciona valores mucho más erróneos que lo que permite suponer el promedio de error encontrado.

Esto ha impulsado la creación de varias técnicas empíricas. Entre otras técnicas podemos mencionar las de Arnold, Gilliland, Wilke-Lee, Slatery-Bird, Bailey, Chen-Othmer, Othmer-Chen y Fuller-Schettler-Giddings. Prácticamente todas producen resultados de exactitud comparable, aunque en algunos sistemas se verifican desviaciones muy superiores al promedio (Reid, Prausnitz y Poling).

Coeficiente de difusión en sistemas líquidos binarios

El coeficiente de difusión en mezclas líquidas es muy inferior al que presentan las mezclas gaseosas debido a la menor movilidad molecular, pero por otro lado los gradientes de concentración que se pueden encontrar son grandes, de modo que la difusividad tiene una influencia gravitante en los fenómenos difusionales del estado líquido. La teoría de la difusión en el estado líquido está todavía en sus comienzos, es muy ideal y no podemos esperar mucho de ella. Sin embargo, como en otros casos, la termodinámica permite deducir las formas de las relaciones que rigen el fenómeno, y luego los investigadores se encargan de encontrar fórmulas empíricas utilizables para fines prácticos. Además, en la actualidad se están dando grandes pasos en el campo de la estimación.

La teoría indica que la difusividad es directamente proporcional a la temperatura e inversamente proporcional a la viscosidad del solvente y al tamaño de las moléculas del soluto. Intuitivamente comprendemos que es así ya que resulta lógico que a mayor agitación térmica molecular haya mayor movilidad, y por lo tanto mayor difusividad del soluto en el solvente. Por otra parte cuanto más viscoso sea el solvente y cuanto mayores sean las moléculas del soluto tanto más dificultad tendrá el soluto para difundirse en el solvente. La ecuación de Stokes-Einstein refleja este enfoque teórico.

$$D_{AB} = \frac{R\ T}{6\ \pi\ \mu_B\ r_A} \qquad \textbf{(68)}$$

donde: μ_B es la viscosidad del solvente y r_A es el radio del soluto, admitiendo que se trata de moléculas esféricas.

También se ha intentado atacar el problema desde otros ángulos. Se ha intentado explicarlo desde la teoría cinética y la mecánica estadística pero con pobres resultados.

Efecto de la temperatura y la concentración en la difusión en los líquidos

No basta estimar la difusividad de una especie química a dilución infinita para simular el comportamiento de los sistemas líquidos, porque en la práctica se encuentran muchas mezclas y soluciones en las que los gradientes de concentración son mucho menores. Será preciso entonces apreciar la influencia de la concentración en la difusividad. Por otra parte, puesto que los métodos que hemos examinado la estiman a temperatura ambiente, será necesario determinar la magnitud de la influencia de la temperatura. Para revisar los métodos apropiados para tales tareas se recomienda un análisis de la bibliografía recomendada.

BIBLIOGRAFÍA

- Manual del Ingeniero Químico, 6 ed. - Perry R. H., ed.
- The Properties of Gases and Liquids - Reid, Prausnitz y Poling (4a ed).
- An Improved Viscosity Temperature Chart for Hydrocarbons - Wright, W.A. - Journal of Materials, vol. 4, n° 1, 1969, pág. 19-27.
- Correlation Constants for Liquids - Yaws y Miller - Chemical Engineering October 23, 1976, pág. 127.
- Jasper J.J - J. Phys. Chem. Ref. Data, vol 1, 1972, pág. 841.
- Propiedades de los Gases y Líquidos - Reid y Sherwood (trad. en castellano de la segunda edición del original en inglés).
- Prediction of the Viscosity and Thermal Conductivity in Hydrocarbon Mixtures by Computer Program TRAPP - Ely y Hanley - Gas Processers Association, Proceedings of the 6th Annual Convention, vol 60, 1981, pág.

20-29.

- Save Time in Computing Density - Hydrocarbon Processing, vol 55, n° 5, 1976, pág. 199-201.
- Equation for Liquid Density - Yaws, Yang, Hopper y Cawley - Hydrocarbon Processing, January 1991, pág. 103.
- Computer calculations for high-pressure vapor-liquid equilibria - Prausnitz y Chueh.
- Heat Capacities for 700 Compounds - Yaws, Ni y Chiang - Hydrocarbon Processing, May 9 1988, pág. 91.
- Technical Data Book - American Petroleum Institute.
- Correlation Constants for Chemical Compounds - Heats of Vaporization - Thakore, Miller y Yaws - Chemical Engineering, August 16 1976, pág. 85.

CAPÍTULO IX

MÓDULO PARA LA SIMULACIÓN DE EVAPORADORES FLASH

Por
Nicolás José Scenna

IX.1 INTRODUCCIÓN

Este equipo consiste en una etapa simple, que en adelante consideraremos de equilibrio, en la cual la alimentación es parcialmente vaporizada. El modelo puede extenderse al equilibrio líquido-vapor (*L*-*V*), líquido-líquido (*L*-*L*) o bien a la formación de dos fases líquidas en equilibrio con la fase vapor (*L*-*L*-*V*).

Si bien el procedimiento de cálculo para resolver el sistema de ecuaciones que describe el comportamiento de este sistema aparenta ser sencillo, en realidad para mezclas multicomponentes de comportamiento fuertemente no-ideal y con un gran número de componentes, involucra un procedimiento iterativo bastante tedioso, sólo implementable por medio de algoritmos programados en computadora, pensando en términos prácticos.

Desde el punto de vista conceptual, comprender los fundamentos de este sencillo equipo de proceso es sumamente importante, ya que el modelado de varias operaciones unitarias está directa o indirectamente vinculado con los conceptos del mismo. Entre otros, podemos mencionar desde los cálculos de las temperaturas de rocío o burbuja, el estado de fase de una corriente dada, hasta el cálculo de equipos hervidores y condensadores parciales, válvulas, bombas y todo equipo que procese mezclas multicomponentes luego de operaciones de transferencia de calor y/o cantidad de movimiento. Además, resulta obvio que los equipos de contacto múltiple etapa en contracorriente para la separación de mezclas multicomponentes (extractores líquido-líquido, absorbedores, *strippers*, columnas de destilación, etc) constituyen, en principio, una cascada de equipos flash conectados de cierta forma, según sea la topología del separador.

El esquema clásico de este equipo se presenta en la Figura (IX.1). La alimentación se calienta en el equipo de intercambio y luego se expande en forma adiabática a través de la válvula. La vaporización que se produce, a partir de la caída brusca de presión, implica la formación de dos fases, las cuales son separadas gracias al tiempo de contacto entre las mismas que permite el tambor separador.

Como hemos visto en capítulos anteriores, el primer paso para modelar el sistema implica listar las hipótesis que se adoptarán para proponer el modelo. Por lo general, el siguiente conjunto de hipótesis es asumido para el cálculo del equipo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

1.- El vapor y líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr equilibrio (no se tienen en cuenta los parámetros geométricos).

2.- La presión de líquido y vapor son las del tambor separador (*ΔP = 0*). Esto implica que no consideramos componentes usuales en el equipo como ser separadores de gotas, etc, y la caída de presión que se origina en ellos.

3.- Existe sólo una fase líquida y vapor (*L-V*).

4.- No existen reacciones químicas.

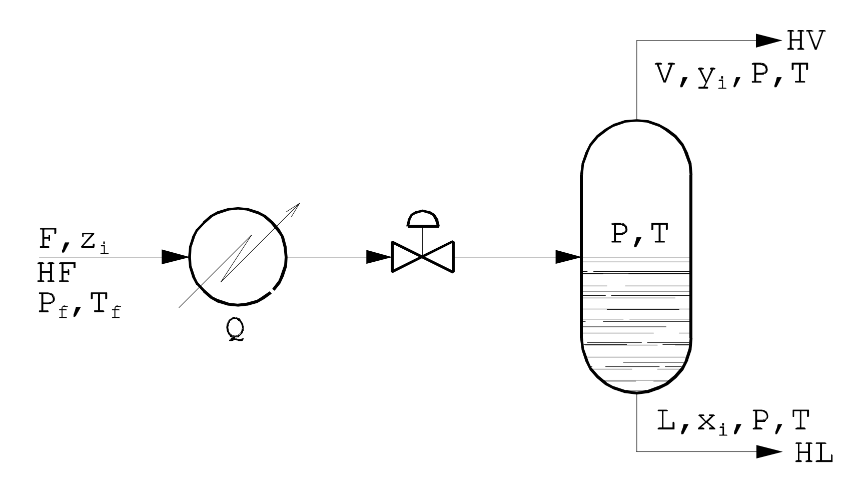


Figura IX.1: Esquema representativo de un equipo flash continuo; el calor *Q* puede ser positivo (alimentación *F* líquida) o bien negativo, con *F* vapor, comportándose como un condensador parcial.

Las ecuaciones correspondientes son las siguientes:

Balance de materia para cada componente:

$$F \; z_i \; = \; V \; y_i \; + \; L \; x_i \qquad i \; = \; 1 \; , \; ... \; , \; NC \tag{1}$$

donde *F* es el caudal molar de la alimentación, z_i es la fracción molar del componente *i* en la alimentación, *V* el caudal molar de la corriente vapor, y_i es la fracción molar del componente *i* en la corriente vapor, *L* el caudal molar de la corriente líquida y x_i es la fracción molar del componente *i* en la corriente líquida. El subíndice *i* en este caso refleja un componente particular dentro de la mezcla de *NC* componentes.

Esta forma de denotar componentes mediante un subíndice es muy común en simulación ya que evita escribir varias ecuaciones remplazándolas por una genérica. En este caso, la notación $i = 1, ..., NC$ indica que existirán NC ecuaciones; en cada una i adopta un valor que representa el componente de la mezcla (primero = 1, segundo = 2, y así sucesivamente).

En el caso de cascadas múltiple-etapa, como se verá en el capítulo posterior, también se acostumbra, y por el mismo motivo expresado anteriormente, a denotar cada etapa con un subíndice.

Balance de materia global:

$$F = L + V \tag{2}$$

Balance de energía:

$$Q + F\ HF = V\ HV + L\ HL \tag{3}$$

donde Q es el calor incorporado (o extraído) en el equipo de intercambio térmico, HF es la entalpía específica de la alimentación, HL es la entalpía del líquido y HV es la entalpía específica del vapor.

Relaciones de equilibrio:

$$y_i = K_i\ x_i \tag{4}$$

donde K_i es la constante de equilibrio para el componente i. Nuevamente, i varía de 1 a NC.

Relaciones termodinámicas:

$$HL = HL\ (P,\ T,\ x) \tag{5}$$

$$HF = HF\ (T_f\ ,\ P_f\ ,\ z) \tag{6}$$

$$HV = HV\ (P,\ T,\ y) \tag{7}$$

$$K_i = K_i\ (T,\ P,\ x,\ y) \tag{8}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En cada una de las ecuaciones anteriores (por ejemplo, la Ecuación (5)), se expresa que existe una funcionalidad que nos brinda el valor *HL*, conocida la presión *P*, la temperatura *T*, y la composición de la mezcla ***x***. Nótese que se utilizó la notación vectorial (compacta) para la composición. Aquí $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, ..., x_{NC})$, esto es, se contemplan todos los componentes de la mezcla. Como se ha visto en los Capítulos VII y VIII, existen varios métodos para estimar entalpías y relaciones de equilibrio, por lo cual según cada caso deberá optarse por el más conveniente.

Relaciones entre las fracciones molares:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i = 1 \qquad (9)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} y_i = 1 \qquad (10)$$

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1 \qquad (11)$$

Análisis de los Grados de Libertad

En función de lo expuesto, se pueden contabilizar ($3\ NC + 7$) ecuaciones independientes (tres de suma, NC+3 relaciones fisicoquímicas, *NC* de equilibrio, *NC-1* de materia para cada componente, una de energía, y una de materia global).

Por otra parte, el número de incógnitas resulta: *3 NC* composiciones, tres caudales totales, temperatura y presión de la alimentación, tres entalpías, el calor intercambiado, NC constantes de equilibrio y la temperatura y presión de operación, lo que nos da ($4\ NC + 11$) incógnitas. De esta manera, de restar del número de incógnitas el número de ecuaciones independientes, se obtiene el número de variables a ser especificadas (NC + 4).

Siguiendo la filosofía modular secuencial pura, se asumen conocidos los valores de las corrientes de entrada (según el sentido físico de orientación de las corrientes en la planta), con lo que P_f, T_f, F y (NC-1) composiciones, esto es, (NC + 2) valores, se asumen conocidos. En consecuencia, sólo dos variables son libres de ser especificadas. Obviamente, como se verá más adelante, no es esta orientación de corrientes la única posible de ser considerada, ya que puede plantearse cualquiera de las otras opciones. Más aún, podrían plantearse casos en los cuales se conozcan algunos valores de la corriente de entrada y de otras variables en una de las de salida, siempre y cuando se respeten los grados de libertad del sistema. Como puede apreciarse, el número de posibilidades es muy grande, pero disponerlas, como vimos,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

brinda mayor flexibilidad respecto de la filosofía modular secuencial pura.

Volviendo al esquema de la Figura (IX.1), suponiendo conocidos los datos de la alimentación, vemos que debemos ahora asignar los restantes dos valores a los efectos de obtener un sistema compatible.

Nuevamente, existen para esta configuración estructural elegida (conocemos la entrada y no las salidas) varias alternativas según sea la asignación que hagamos de las dos variables que se deben especificar.

IX.2 FLASH ISOTÉRMICO

Una especificación común es la que corresponde al flash isotérmico. En este caso, se especifican la presión y temperatura de operación del equipo (de ahí el nombre, ya que la temperatura se fija). Como consecuencia de las hipótesis adoptadas (1 y 2), la presión y temperatura (equilibrio entre fases) de las corrientes de salida son iguales a las especificadas para el equipo. Resta ahora calcular las restantes variables de las corrientes de salida.

En consecuencia, como en todos los casos, recurrimos a las ecuaciones que resultan de plantear los balances de materia y energía:

Balance de energía:

$$F\ HF + Q = V\ HV + L\ HL \tag{12}$$

Balance de materia:

$$F\ z_i = V\ y_i + L\ x_i \tag{13}$$

Si se define a la fracción vaporizada θ como la relación caudal de vapor producido a caudal de alimentación ($\theta = V/F$) y utilizando la relación de equilibrio $y_i = K_i\, x_i$, además del balance ($L = F - V$), se tiene:

$$F\ z_i = \theta\ F\ K_i\ x_i + F\ (1 - \theta)\ x_i$$

Dividiendo ambos términos por F, tomando como factor común x_i y reordenando, resulta:

$$z_i = x_i\ [(\theta\ K_i + 1) - \theta]$$

despejando x_i y tomando como factor común θ, se obtiene:

$$x_i = \frac{z_i}{\theta\ (K_i - 1) + 1} \tag{14}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

recordando además que $y_i = K_i\, x_i$:

$$y_i = \frac{K_i\ z_i}{\theta\ (K_i - 1) + 1} \tag{15}$$

Luego, utilizando la siguiente ecuación, que debe cumplirse necesariamente por definición, ya que ambos términos deben sumar la unidad,

$$\sum_{l=1}^{NC} y_i - \sum_{l=1}^{NC} x_i = 0 \tag{16}$$

Reemplazando las Ecuaciones (14) y (15) en la (16) se obtiene:

$$\sum_{l=1}^{NC} \frac{(K_i - 1)\ z_i}{\theta\ (K_i - 1) + 1} = 0 \tag{17}$$

Esta última ecuación nos permite fácilmente calcular θ, ya que ésta es la única incógnita, suponiendo que K_i es una función sólo de T y P, ya conocidas. Esta estrategia de cálculo fue propuesta por Rachford y Rice (1952).

Existen otras estrategias para lograr ecuaciones similares a la anterior, aunque la forma presentada más arriba ha probado ser conveniente desde el punto de vista numérico.

La estrategia de resolución numérica para obtener los valores de las corrientes de salida será, en consecuencia, la siguiente:

0.- Adoptar un valor inicial para θ.

1.- Resolver la Ecuación (17) por algún procedimiento iterativo (por ejemplo, Newton-Raphson (N-R)).

2.- Obtenido el valor de θ que satisface a la Ecuación (17), calcular los valores x_i e y_i utilizando las Ecuaciones (14) y (15).

3.- Obtener los caudales molares de las corrientes de vapor y líquido a partir de la fracción vaporizada: $V = \theta\, F$, $L = F - V$.

4.- Conociendo los valores de los caudales y las composiciones, utilizar el balance de energía para calcular el valor Q (calor intercambiado) utilizando la Ecuación (12).

5.- Imprimir resultados o depositarlos en el banco de datos del simulador.

Este procedimiento de cálculo es muy robusto y suficientemente probado, en especial a través del análisis matemático del comportamiento de la función de chequeo (17) en función de la fracción vaporizada (que varía entre cero y uno). Generalmente el procedimiento iterativo adoptado es el de Newton-Raphson. La derivada puede calcularse de la expresión analítica derivando la Ecuación (17) en función de θ.

El principal problema aquí surge cuando se aplica este método a sistemas en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

los cuales la constante de equilibrio es fuertemente dependiente de las composiciones del líquido y del vapor (mezclas de comportamiento no ideal). En este caso, el comportamiento de la Ecuación (17) es fuertemente no lineal y no resulta conveniente el esquema anteriormente planteado. Para este problema existen diversas opciones. Una de ellas utiliza la estrategia anteriormente explicada, agregando un nuevo lazo de iteración, que contempla la variación de K con las composiciones.

Esquemáticamente, los pasos a seguir en este caso son los siguientes:

0.- Estimar valores iniciales para $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$.
1.- Resolver la Ecuación (17) para el valor de θ con la misma técnica anterior.
2.- Calcular, a partir de θ, el valor de las composiciones $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$, utilizando las Ecuaciones (14) y (15).
3.- Comparar los valores obtenidos para $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$ con los utilizados (supuestos) en la iteración anterior. Si coinciden, pasar al paso (4). De lo contrario, volver a (1). Usar los valores recientemente calculados de $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$ para la nueva iteración (sustitución directa) o bien utilizar métodos acelerados (Wegstein).
4.- Con el valor de θ, y los valores de $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$, obtener los caudales de vapor y de líquido.
5.- Calcular, utilizando la Ecuación (12), el calor intercambiado.
Pare

Este algoritmo se indica esquemáticamente en la Figura (IX.2). Aquí es conveniente recordar, como vimos en los Capítulos VII y VIII, que el cálculo de *HV*, *HL* y *K* implica funciones muy complejas. Para el caso de mezclas no ideales, como las azeotrópicas, por ejemplo, el esfuerzo de cálculo y la complejidad de las funciones respectivas es muy importante y no debe subestimarse.

En efecto, puede afirmarse que la mayor parte del tiempo de cómputo es empleado en realizar los cálculos de las propiedades fisicoquímicas.

Por otro lado, si bien el método (algoritmo) asegura que los balances son cerrados con la exactitud que se desee, ello no significa que el resultado sea correcto. En efecto, los resultados obtenidos representarán el funcionamiento del equipo aceptablemente o no, según la bondad de la estimación de las propiedades fisicoquímicas que obtengamos. Esto implica que debe seleccionarse un método adecuado, ya que de lo contrario, todo el esfuerzo en ganar exactitud en los criterios de error asignados a los balances respectivos no se compadecerá con la realidad física del problema a resolver. Es muy importante insistir en que pequeños errores en la estimación de las propiedades respectivas pueden generar errores importantes en los resultados finales.

Ejemplo:

Sea un equipo flash isotérmico a presión constante (*P= 50 psia* y *T = 150 ºF*). La alimentación es una mezcla de hidrocarburos con la composición de la tabla.

Calcular, a partir de las propiedades aproximadas indicadas en la tabla, la fracción vaporizada y composición de las corrientes de salida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

COMPONENTE	*FRACCIÓN MOLAR*	K_i *(a las condiciones del flash)*
C_2	0.05	1625
C_3	0.15	5.25
C_4	0.25	1.99
C_5	0.20	0.75
C_6	0.35	0.29

Solución:

Aplicamos el algoritmo indicado para el flash isotérmico (ver Figura IX.2). Para ello debemos determinar θ de la Ecuación (17).Utilizaremos el método de Newton - Raphson:

Valor estimado para θ_0, *0.4.*

$f(\theta_0) = (15.25)\ 0.05 / (0.4\ (15.25) + 1) + (4.25)\ 0.15 / (0.4\ (4.25) + 1) + 0.99\ (0.25) / (0.4\ (0.99)+1) + (-0.25)\ 0.2 / (0.4\ (-0.25) +1) + (-0.71)\ 0.35 / (0.4\ (-0.71) +1) = 0.1181$

$f'(\theta_0) = (f(\theta_0 + \Delta\theta) - f(\theta_0)) / \Delta\theta = (0.1181 - 0.0558\ ) / 0.05 = -1.1933$ *con* $\Delta\theta = 0.05$

Aquí podría haberse derivado la expresión analítica de $f'(\theta)$, lo cual ahorra tiempo de cómputo. Sin embargo, para casos en los cuales la funcionalidad es muy compleja, es conveniente recurrir a derivadas numéricas; que para ejemplificar es lo que se realiza a continuación. Luego:

$\theta_1 = 0.4 - 0.1181 / (-1.1933) = 0.4989$

$f\ (\theta_1) = 0.01662$

Debemos entonces calcular el siguiente valor para la variable independiente:

$f'(\theta_1) = (-0.03213 - 0.01662) / 0.05 = -0.975$

$\theta_2 = \theta_1 + \Delta\theta = 0.4989 - 0.01662 / (-0.975) = 0.516$

$f(\theta_2\ ) = 0.00014$

Luego, $L/V = \theta_2 = 0.516$ es la fracción vaporizada. A partir de este valor es fácil calcular los correspondientes caudales y las composiciones respectivas, según las ecuaciones ya obtenidas. Esta tarea se deja en manos del lector.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

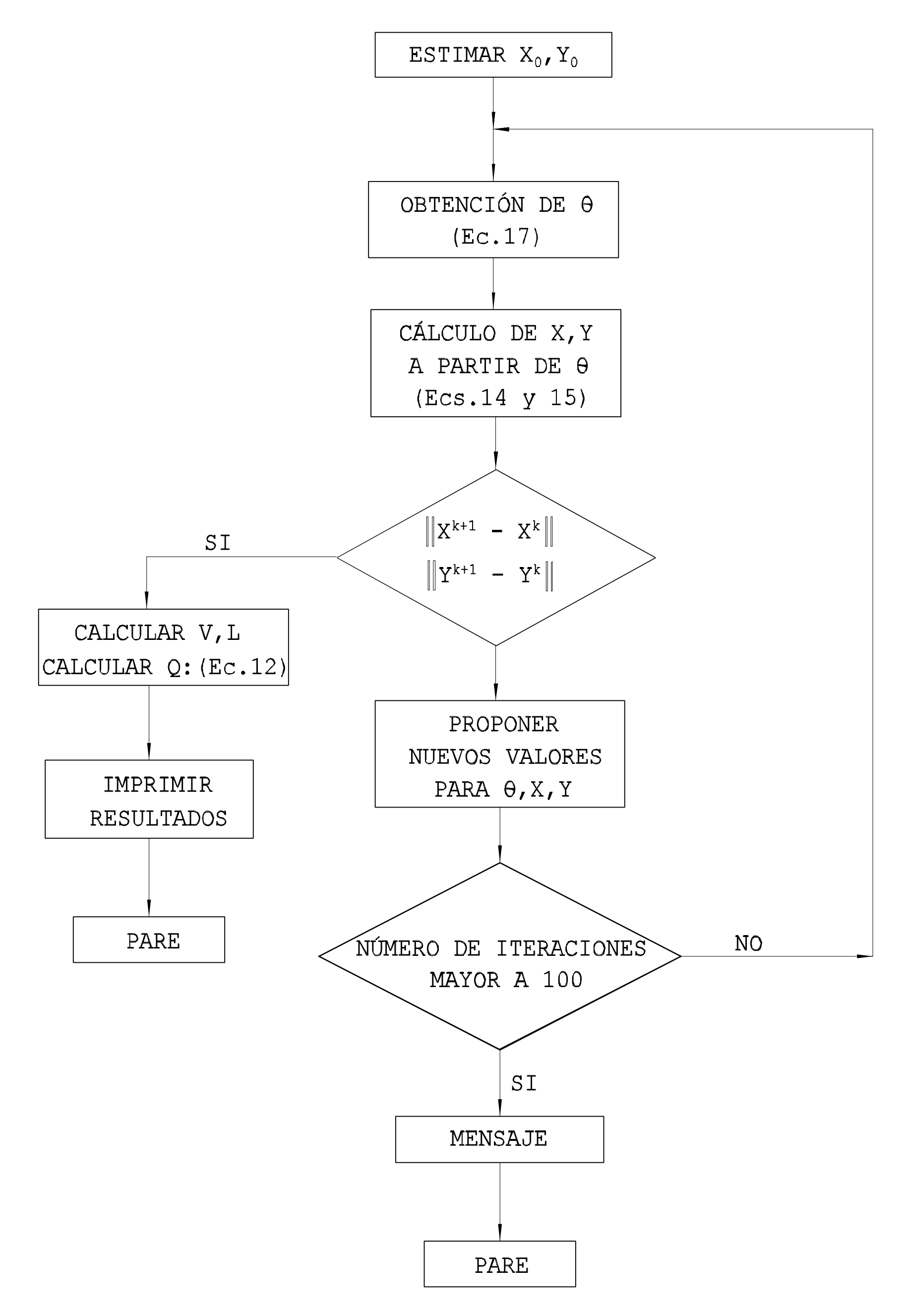


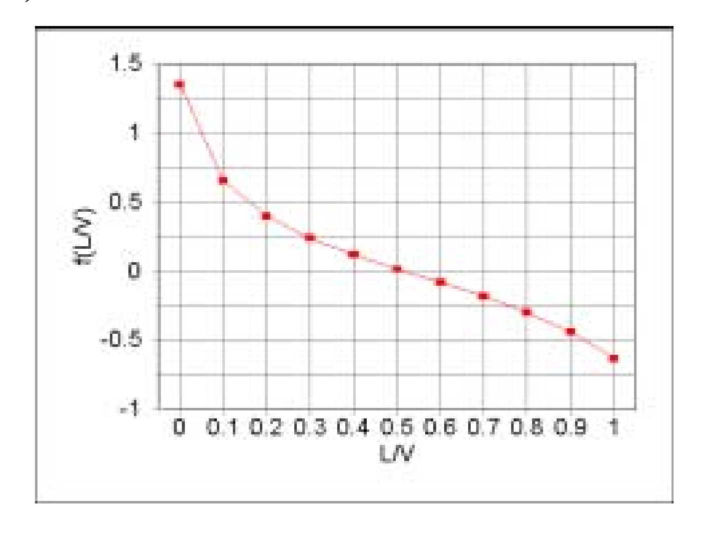
Figura IX.2: Esquema lógico de cálculo de un flash isotérmico.

Para verificar la solución obtenida, exploraremos el comportamiento de $f(\theta)$. En la tabla siguiente se muestran en la primer columna los valores de la fracción vaporizada (*L/V*), mientras que en las restantes se consignan los valores parciales de cada sumando y en la última, la suma total, o *f(V/F)*. Puede observarse que el valor de (*V/F*) en el cual *f* se anula, está comprendido entre *0.5* y *0.6*.

Tabla IX.1: Cálculo de la fracción vaporizada *f(V/F)*.

V/F	1er. Término	2do. Término	3er. Término	4to. Término.	5to. Término	f(V/F)
0,00	0,762500	0,637500	0,247500	-0,050111	-0,248500	1,348889
0,10	0,301980	0,447368	0,225205	-0,051282	-0,267492	0,655779
0,20	0,188272	0,344595	0,206594	-0,052632	-0,289627	0,397202
0,30	0,136771	0,280220	0,190825	-0,054054	-0,315756	0,238006
0,40	0,107394	0,236111	0,177292	-0,055556	-0,347067	0,118175
0,50	0,088406	0,204000	0,165552	-0,057142	-0,385271	0,015544
0,60	0,075123	0,179577	0,155270	-0,058824	-0,432927	-0,081780
0,70	0,065310	0,160377	0,146190	-0,060606	-0,494036	-0,182764
0,80	0,057765	0,144886	0,138114	-0,062500	-0,575231	-0,296966
0,90	0,051783	0,132124	0,130883	-0,064516	-0,688366	-0,438092
1,00	0,046923	0,121429	0,124372	-0,066667	-0,856897	-0,630840

A continuación se grafican los valores obtenidos, a los efectos de mostrar la curva *f(V/F)*.



ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como puede observarse, la solución hallada se corresponde con la indicada en la tabla y en la figura.

Aquí es conveniente remarcar que para facilitar la comprensión de la mecánica de cálculo se ha recurrido a un ejemplo sumamente sencillo, especialmente debido a la simplificación utilizada para el cálculo de las constantes de equilibrio (aquí se asumen independientes de las composiciones). En casos reales, como ya discutimos, debe recurrirse al cálculo riguroso de las propiedades de la mezcla.

IX.3 FLASH ADIABÁTICO

Una especificación muy común es la que corresponde a un flash adiabático ($Q = 0$). En este caso, fijado Q, sólo nos queda por asignar una variable, por ejemplo, la presión de operación del sistema. De esta manera, quedan por calcularse la temperatura y demás propiedades de las corrientes de salida.

Dado que se desconoce la temperatura, el balance de energía, contrariamente al caso isotérmico, queda acoplado y debe resolverse simultáneamente a la Ecuación (17).

Cuando la constante de equilibrio no depende de las composiciones, puede utilizarse un método iterativo simultáneo (Newton-Raphson) en las dos variables (θ, T). Para ello, la Ecuación (12) que surge del balance de energía debe explicitarse en función de las variables independientes. Consecuentemente debe introducirse θ en función de su definición, lo cual se logra dividiendo todos los términos por F y utilizando la relación ($L = F - V$). Además, conviene dividir todos los términos por el valor conocido (constante) de la entalpía de alimentación, a los efectos de trabajar con las dos ecuaciones dentro de un orden relativo de magnitudes similares, lo cual elimina problemas numéricos y errores de redondeo durante el proceso de iteración.

$$1 - \theta \frac{HV}{HF} - (1 - \theta) \frac{HL}{HF} = 0 \qquad (18)$$

La Ecuación (18) junto a la Ecuación (17) conforman el sistema de ecuaciones a resolver. El algoritmo, en este caso, es el siguiente:

1.- Estimar un valor inicial para la temperatura y la fracción vaporizada.

2.- Comparar el valor de las funciones de discrepancia con respecto al error permitido para las ecuaciones de energía y sumatoria (Ecuaciones (17) y (18)). Si se satisface el criterio, ir a (6). De lo contrario, seguir con el paso (3).

3.- Generar la matriz Jacobiana evaluando las derivadas parciales de ambas funciones con respecto a ambas variables (matriz de 2 x 2).

4.- Calcular, resolviendo el sistema correspondiente, los incrementos para la temperatura y fracción vaporizada, a los efectos de obtener los nuevos valores para ambas variables de iteración.

5.- Calcular el nuevo valor de las variables independientes (T y θ). Si se ha

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

cubierto el número preestablecido de iteraciones, terminar, utilizando un mensaje que advierta que no se ha logrado la convergencia. De lo contrario ir a (2).

6.- Imprimir resultados o archivarlos en el banco de datos del simulador. Pare.

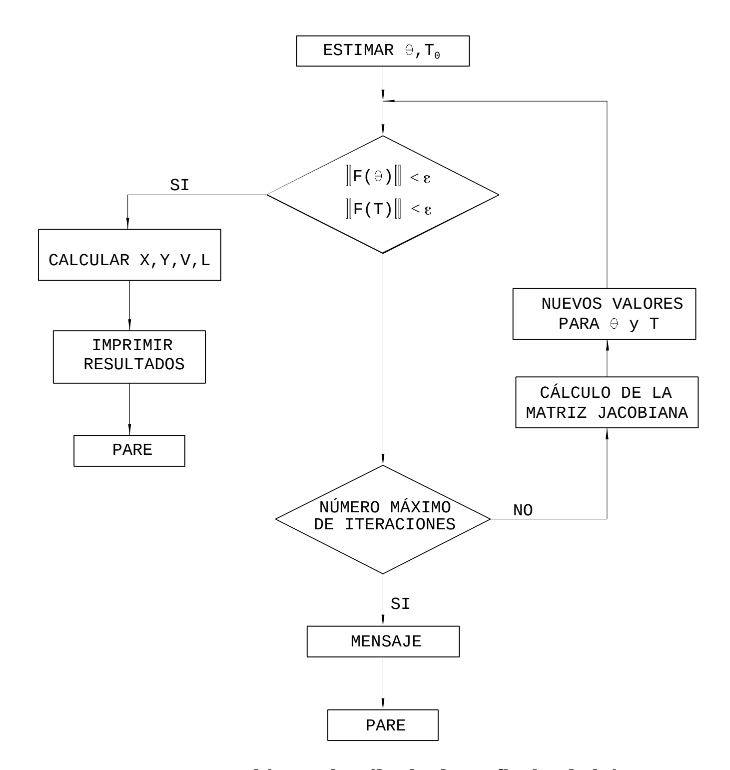


Figura IX.3: Esquema lógico de cálculo de un flash adiabático. Iteraciones simultáneas (θ y T).

En la Figura (IX.3) se indica esquemáticamente este algoritmo. En lugar de adoptar esta estrategia, pueden utilizarse dos niveles anidados de iteración, uno para la temperatura y otro para la fracción vaporizada. En este caso, si se utiliza por ejemplo un lazo de iteraciones externo para la temperatura, el lazo interno resulta

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

equivalente al problema del flash isotérmico; por lo que el mismo puede resolverse utilizando parcialmente un procedimiento conocido y tal vez implementado computacionalmente, por lo cual se encuentra a disposición. No obstante, el orden de convergencia (y por lo tanto la velocidad) es menor que en el caso anterior.

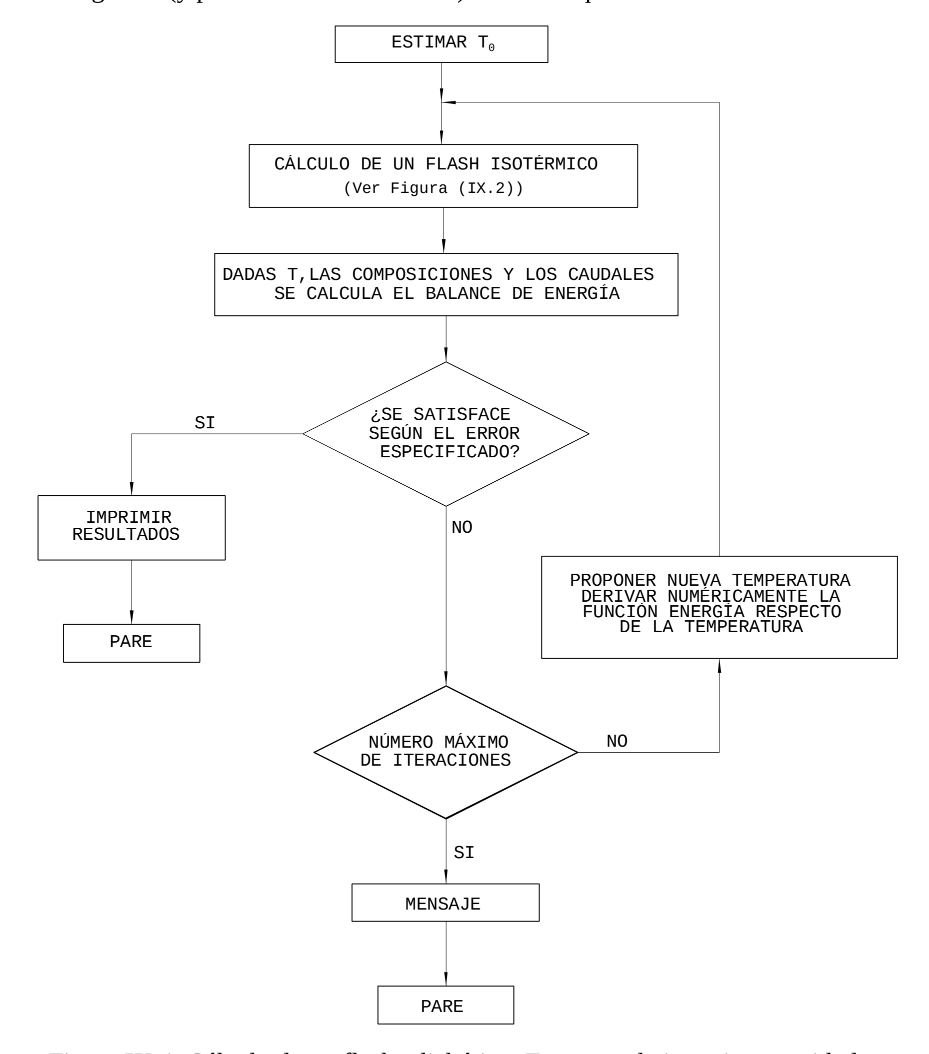


Figura IX.4: Cálculo de un flash adiabático. Esquema de iteraciones anidadas.

Aquí el procedimiento de resolución resulta:

1.- Se adopta una temperatura inicial.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

2.- Fijada la temperatura, se resuelve el problema del flash isotérmico según ya se ha explicado.

3.- Se calcula, según las composiciones y temperaturas resultantes, el balance de energía. Si éste es satisfecho según el error establecido, detener el cálculo (ir a (5)); de lo contrario, seguir con (4).

4.- Calcular, por Newton-Raphson la nueva temperatura. Si se supera el número de iteraciones permitidas detener y escribir un mensaje de advertencia. De lo contrario, ir a (2).

5.- Imprimir resultados o bien almacenarlos en el banco de datos del simulador. Pare.

En la Figura (IX.4) se indica esquemáticamente el procedimiento de cálculo. Como mencionamos, este método es más lento que el anterior, pero tiene la ventaja de la sencillez de la programación, más aún, si se dispone del programa de cálculo del flash isotérmico. Además, tanto en el método de iteración simultáneo expuesto anteriormente como en el procedimiento desacoplado, se supone como hipótesis implícita que los valores de K_i no son función de las composiciones. En caso contrario debe implementarse un lazo de iteración para las composiciones, como ya hemos visto para el flash isotérmico (ver Fig. (IX.2)). En la estrategia de solución en forma simultánea, sólo debe agregarse un lazo externo de forma similar a lo ya explicado para el problema anterior.

Existe además otro inconveniente en el caso de la estrategia de lazos desacoplados. En efecto, existen mezclas cuyas constantes de equilibrio son sensibles a pequeñas variaciones de temperatura, mientras que otras se caracterizan por lo contrario. De tal forma, para el caso de gran sensibilidad a la temperatura, en el procedimiento de resolución por lazos desacoplados pueden presentarse inconvenientes en la convergencia (ya que ésta está incorporada al lazo externo); siendo conveniente en estos casos iterar en forma inversa, es decir, un lazo externo que involucre la fracción vaporizada y otro interno que involucre la temperatura. Consecuentemente, para conseguir generalidad, resulta conveniente implementar el método simultáneo y para casos no ideales, agregar un lazo de convergencia externo que maneje las composiciones.

IX.4 FLASH A FRACCIÓN DE VAPORIZACIÓN DADA(O DE LICUEFACCIÓN)

En esta opción se asumen como datos especificados la presión y la fracción vaporizada (licuificada). Este caso se presenta en el planteo de hervidores y condensadores parciales (se asume despreciable el ΔP -caída de presión- a través del equipo). En efecto, dadas la alimentación, la presión de operación y la fracción de evaporación (condensación) deseadas, se calculan los caudales y composiciones de las corrientes de salida y el calor intercambiado para la tarea especificada.

Para resolver este problema, puede observarse a partir de la Ecuación (17)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

que dado el valor de θ (si K no depende de $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$), se deberá utilizar un procedimiento iterativo para obtener a partir de la misma, la temperatura, y con ella, mediante el balance de energía, el calor intercambiado. En caso que la constante de equilibrio sea función de las composiciones, debe utilizarse un lazo de iteración externo para converger dichas variables. El algoritmo por lo tanto resulta:

CASO I (K no depende de ***x*** *e* ***y****)*

1.- Asuma T inicial.
2.- Usando la Ecuación (17), verificar convergencia. Si se cumple el criterio de error permitido, pasar a (3). De lo contrario, proponer una nueva temperatura por algún método (N-R). Si se cumple el número de iteraciones máximo permitido, detener el proceso, imprimiendo un mensaje de advertencia.
3.- Obtenida la convergencia en T, utilizando el balance de energía, calcular el valor de Q intercambiado.
4.- Detener la ejecución, imprimir los resultados, o almacenarlos en el banco de datos del simulador.

CASO II (K es función de ***x*** *e* ***y****)*

0.- Asuma $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$.
1.- Asuma T.
2.- Usando la Ecuación (17), verificar convergencia. Si se cumple, pasar a (3). De lo contrario, proponer una nueva temperatura por algún método por ejemplo (N-R). Si se cumple el número de iteraciones establecido detener el proceso, imprimiendo un mensaje de advertencia.
3.- Obtenida la temperatura, mediante las Ecuaciones (14) y (15), calcular $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$. Si se cumple el criterio de convergencia (comparando los valores de dichas composiciones entre dos iteraciones sucesivas), pasar a (4). De lo contrario, retornar a (2), proponiendo antes nuevos valores de $\boldsymbol{x}$ e $\boldsymbol{y}$ mediante sustitución directa o Wegstein). Si se excede el número de iteraciones permitidas detener el proceso e imprimir un mensaje de error.
4.- Con los valores calculados y mediante el balance de energía, determinar Q.
5.- Imprimir resultados o almacenarlos en el banco de datos del simulador. Pare.

IX.5 OTRAS ESPECIFICACIONES PARA EL EQUIPO FLASH

Existe otro conjunto de especificaciones, fijando la temperatura en el lugar de la presión de operación en los casos anteriores (por ejemplo en el flash adiabático). En este caso deberá procederse a calcular la presión en lugar de la temperatura en los correspondientes lazos de iteración. Por lo tanto, deberá analizarse la relación de las distintas variables en función de la presión (por ejemplo, entalpías que son poco sensibles a la misma, constantes de equilibrio, etc). La filosofía de resolución es similar a la expuesta anteriormente. Se deja para el lector como ejercicio el planteo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de los diversos algoritmos posibles para cada caso.

Otras variantes de especificación para el equipo flash surgen de fijar valores de composiciones, tanto en las corrientes de salida líquida como en la corriente de vapor, de algún componente (componente clave) o bien el caudal molar (en el líquido o vapor). En este caso existe el problema potencial de especificar combinaciones incompatibles (sin sentido físico), en función de la composición de la alimentación, la separación especificada y caudal de salida fijado.

Por otra parte, estructuralmente, podemos plantear aún nuevas opciones para el equipo de separación flash. En efecto, según lo indicado en el Capítulo V, vimos que existen distintas filosofías para la construcción de simuladores generales de procesos químicos, aún dentro de los simuladores modulares.

La estrategia seguida hasta este momento coincide con la filosofía modular secuencial pura; ya que se suponen los equipos orientados de tal forma que siempre conocemos las entradas y desconocemos las propiedades asociadas a las corrientes de salida (excepto algunos casos especiales en los cuales los grados de libertad del sistema de ecuaciones permiten fijar alguna de las variables de las corrientes de salida - por ejemplo, alguna composición en la corriente vapor o líquido de salida en el flash-). Relajando el criterio de la filosofía modular secuencial, los equipos pueden estar orientados de todas las formas posibles (siempre y cuando definan un sistema compatible). En el caso del flash, por ejemplo, podemos entre otras alternativas posibles, suponer conocidas o bien la corriente de vapor o bien la de salida líquida, debiéndose calcular las demás.

Para resolver el problema planteado pueden utilizarse los mismos procedimientos anteriormente descritos, teniendo en cuenta que ahora algunas especificaciones (equivalentes con el caso anterior) pueden involucrar inconsistencias. Además, las ecuaciones que resulten serán distintas y los métodos o estrategias de iteración más convenientes para los casos anteriores pueden no serlo para los aquí planteados.

Por ejemplo, supongamos la especificación correspondiente a un flash isotérmico para la configuración de la Figura (IX.5). Obviamente, tendremos los mismos grados de libertad que en el caso anterior, lo cual puede comprobarse siguiendo el mismo procedimiento que ha sido detallado, tarea que se deja como ejercicio para el lector. Las dos variables a especificar en el flash isotérmico son la temperatura y la presión. En consecuencia, como hemos visto, quedan desacoplados los balances de materia y energía.

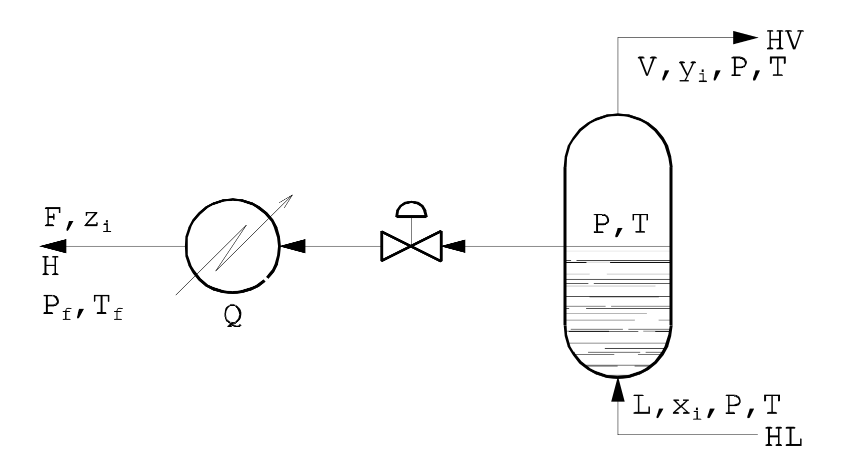


Figura IX.5: Esquema representativo del flujo de información para un equipo de separación de equilibrio flash cuando suponemos conocida la corriente líquida de salida del equipo (el flujo físico sigue siendo el de los ejemplos anteriores).

De la ecuación (13), dividiendo por el caudal conocido, *L* y reemplazando *V* por (*F*-*L*), según el balance global, y definiendo $\varphi = L/F$, se tiene:

$$z_i = (1 - \varphi)\, y_i + \varphi\, x_i \qquad (19)$$

Reemplazando y_i por $K_i\, x_i$, queda:

$$z_i = x_i\, [K_i\, (1 - \varphi) + \varphi] \qquad (20)$$

Reemplazando en la fórmula de chequeo (similar a la Ecuación (16)) resulta:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i - \sum_{i=1}^{NC} y_i = 0 \qquad (21)$$

Luego de operar algebraicamente, obtenemos:

$$\sum_{i-1}^{NC} [x_i\ \varphi(K_i - 1] = 0 \qquad (22)$$

Esta ecuación puede ser resuelta para φ por un método convencional (por ejemplo, N-R), siendo $0 \leq \varphi \leq 1$. Obtenido el valor de φ pueden calcularse y_i y x_i, con cuyos valores, más la temperatura y la presión de operación, puede calcularse *Q* de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ecuación (12).

Para el caso adiabático, como hemos visto, se acopla el balance de energía, y debe ser introducida la variable φ en dicha ecuación, por medio de manipulaciones algebraicas similares a las realizadas anteriormente para el caso homólogo. Una vez obtenidas las dos ecuaciones, el procedimiento para lograr las soluciones es bastante similar a los utilizados anteriormente. Sin embargo, cada ecuación propuesta y el método numérico seleccionado para la misma debe ser probado con relación a un número elevado de ejemplos, de tal forma de encontrar una estrategia adecuada, óptima en el sentido genérico de su performance.

Nuevamente, debe advertirse que especificaciones que involucren fijar composiciones de las corrientes de salida no siempre resultan compatibles o consistentes bajo la faz operativa, por lo que deben utilizarse con precaución. Naturalmente, puede también asumirse como conocida la corriente vapor, en cuyo caso, deberían realizarse todos los pasos ya explicados para desarrollar estrategias de cálculo para cada opción factible.

IX.6 OTRAS APLICACIONES DE LOS ALGORITMOS PARA SIMULACIÓN DE EVAPORADORES FLASH

Hasta aquí hemos discutido distintas posibilidades para el desarrollo de modelos correspondientes a un equipo de evaporación flash. No obstante, como se ha mencionado en la introducción de este capítulo, el alcance del modelo correspondiente a este equipo va mucho más allá de lo expuesto.

En efecto, las relaciones obtenidas corresponden al comportamiento de una etapa en equilibrio en equipos de separación de mezclas por etapas de contacto. En consecuencia, las etapas de equilibrio de diversos de estos equipos, como ser absorbedores, desorbedores, equipos de destilación, de extracción líquido-líquido, intercambio iónico, etc, responden a modelos fuertemente vinculados al aquí planteado. Más aún, procedimientos de solución de equipos múltiple-etapa que adoptan estrategias etapa a etapa, se basan mayoritariamente en las ecuaciones obtenidas anteriormente. Sin embargo, como se verá en el próximo capítulo, los métodos de solución adecuados para equipos múltiple-etapa (especialmente para mezclas no-ideales) adoptan la estrategia simultánea (matriciales), ya que la acumulación de errores que provocan la imposibilidad de convergencia impiden la aplicación de una estrategia etapa a etapa (etapas de flasheo) para la simulación de equipos que involucran mezclas no ideales. No obstante, la vinculación conceptual de cualquier algoritmo (aún los más sofisticados) con los aquí planteados resulta inevitable.

IX.6.1 Separadores Líquido-Líquido

Para un contactor líquido-líquido, por ejemplo un decantador-separador líquido-líquido (*L-L*), los modelos anteriormente desarrollados pueden aplicarse fácilmente. En efecto, basta ahora con asignar los símbolos V e y_i al caudal y

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

composiciones de la segunda corriente líquida, por ejemplo, la menos densa que sale del decantador líquido-líquido, alimentado con una corriente *F* con las propiedades especificadas *z*, T_f y P_f. Obviamente, ahora la constante de equilibrio K_i será la de reparto de cada especie *i* entre las dos fases líquidas y deberá ser calculada en forma adecuada, utilizando correlaciones fisicoquímicas apropiadas (ver Figura (IX.6)).

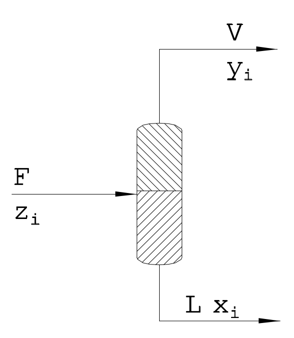


Figura IX. 6: Equipo de separación de dos fases líquidas en equilibrio.

Si existiera, por las condiciones de la alimentación y las de operación del equipo, la posibilidad de existencia de una fase vapor en equilibrio con las dos fases líquidas, esto es equilibrio líquido-líquido-vapor, (*L-L-V*), deben incorporarse (a los modelos planteados para el caso L-V) las ecuaciones correspondientes al equilibrio líquido-líquido y además el balance de materiales para cada fase, según lo indicado en la Figura (IX.7). Se deja el planteo del modelo para resolver este equipo como ejercicio para el lector.

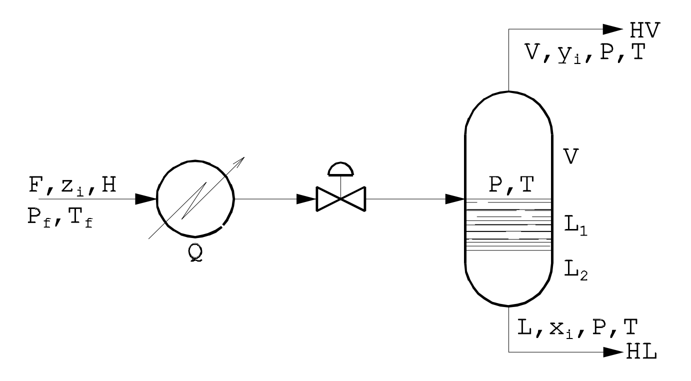


Fig. IX.7: Esquema representativo de un sistema de separación flash en el cual se forman dos fases líquidas.

Cálculos de Puntos de Burbuja y Rocío

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como es conocido, por definición, temperatura de rocío (a una dada presión) es la temperatura a la cual se forma la primera gota de condensado en la mezcla. Análogamente, la temperatura de burbuja es la temperatura (a una dada presión) a la cual se forma la primera burbuja en la mezcla. Por otra parte, definiciones equivalentes pueden darse para la presión de burbuja y rocío (a una dada temperatura). Se supone que existe transferencia de calor según el sentido que corresponde.

Aquí nos interesa encontrar una forma de calcular, dada la composición de la mezcla, la temperatura (fijada la presión) o presión (fijada la temperatura) de rocío y burbuja respectivamente.

IX.6.2 Temperatura de Burbuja

Si aplicamos la definición de temperatura de burbuja y analizamos la Ecuación (17), vemos que dada la presión, encontrar la temperatura a la cual aparece la primer burbuja de vapor en la mezcla líquido-vapor en equilibrio, equivale conceptualmente a la siguiente condición límite:

Encuentre T tal que se cumpla la expresión entre llaves cuando $\theta \rightarrow 0$,

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \left\{ \sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i \ (K_i - 1)}{1 + \theta \ (K_i - 1)} \right\} = 0 \qquad (23)$$

Resolviendo, en el límite se tiene:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i - \sum_{i=1}^{NC} z_i \ K_i = 0 \qquad (24)$$

De donde debe satisfacerse:

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i \ K_i = 1 \qquad (25)$$

como condición de punto de burbuja.

El algoritmo para encontrar la temperatura T que satisface la Ecuación (25) debe contemplar el caso más general en el cual $K_i = K_i \ (T, P, x_i, y_i)$. En general, un algoritmo robusto, que logre convergencia para cualquier caso, es difícil de implementar, debiéndose tener en cuenta varios factores (volátiles en la mezcla - hidrógeno, nitrógeno, por ejemplo, fuertes no idealidades, presiones elevadas, y por lo tanto fase vapor no ideal, etc.). Generalmente se usan los métodos de Newton-Raphson, Muller, o bien para casos más específicos, el método de la secante.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

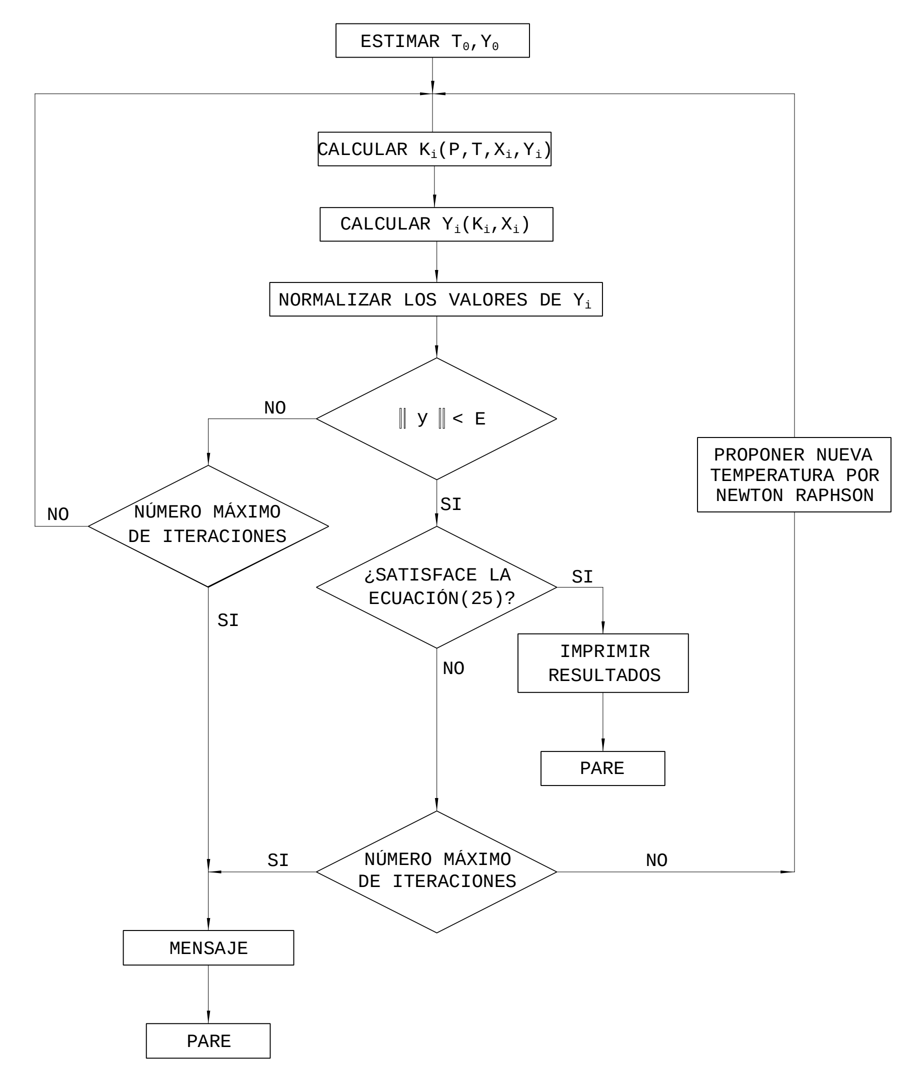


Figura IX.8: Estrategia para el cálculo de la temperatura de burbuja.

Un posible algoritmo es el siguiente:

Dados P y la composición de la mezcla, $z_i \cong x_i$*:*

1.- Estimar T inicial (T_o) y composición de vapor inicial (y_o).

2.- Calcular $K_i = K_i\ (T, P, x_i, y_i)$.

3.- Calcular $y_i = K_i\, x_i$.

4.- Normalizar los valores de y_i y comparar con los supuestos en (1). Si no

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

satisface el criterio de tolerancia, volver a (2) proponiendo el mismo conjunto y_i recientemente calculado (sustitución directa) o bien utilizar métodos de aceleración de convergencia (Wegstein). Si se satisface el criterio de error, ir a (5).

5.- Se evalúa la Ecuación (25). Si no se satisface el criterio de tolerancia (error) especificado, volver a (2). Proponer un nuevo valor de la temperatura utilizando el criterio de Newton-Raphson o el de Muller. Si se satisface el criterio de error especificado, ir a (6).

6.- Depositar el valor de la temperatura obtenida en la base de datos del simulador o transferir la misma al programa de cálculo que la requiere; o bien imprimir el resultado.

7.- Parar.

Esquemáticamente se obtiene un diagrama de flujo como el indicado en la Figura (IX.8).

IX.6.3 Temperatura de Rocío

Siguiendo el mismo razonamiento que en el caso anterior, ahora debemos preguntarnos acerca de la condición a aplicar a la Ecuación (17) que representa la condición de equilibrio líquido-vapor de nuestra mezcla de la cual requerimos calcular la temperatura de rocío. Dado que en este caso, por definición de dicha temperatura, debemos encontrar la condición de equilibrio a la cual (fijada la presión) aparece la primer gota de condensado; la condición que debe cumplirse es el límite cuando la fracción líquida tiende a cero (o bien la fracción vaporizada tiende a uno). Es decir que la Ecuación (17) debe cumplirse en dicho límite.

$$\lim_{\theta \to 1} \left\{ \sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i \, (K_i - 1)}{1 + \theta \, (K_i - 1)} \right\} = 0$$

Resolviendo el límite, y operando algebraicamente, se obtiene la siguiente expresión (condición a cumplirse para el cálculo de temperatura de rocío):

$$\sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i}{K_i} = 1 \qquad (26)$$

En este caso, el algoritmo para el cálculo resulta:

Dados P y la composición de la mezcla $z_i \cong y_i$:

1.- Estimar la temperatura T y la composición inicial de líquido $\mathbf{x}$.

2.- Calcular $K_i = K_i\,(T, P, x_i, y_i)$.

3.- Calcular x_i ($x_i = z_i / K_i$).

4.- Normalizar los valores obtenidos para x_i. Verificar si se cumple el criterio de

tolerancias especificado al compararlas con los valores adoptados. Si no se cumple, ir a (2), estimando las nuevas x_i según Wegstein. Si se logra converger en los x_i (es decir la diferencia entre las normas de los vectores de composición consecutivos es menor que el error o tolerancia especificado), ir a (5).

5.- Verificar si se cumple el criterio de tolerancia adoptado para la Ecuación (26). Si no se cumple, ir a (2). Proponer un nuevo valor de T utilizando Newton-Raphson o Muller. Si se cumple, ir a (6).

6.- Imprimir el resultado, o bien depositarlo en la base de datos del simulador. Parar.

Para mezclas ideales, se anula el lazo de composiciones. Si en lugar de las temperaturas deben calcularse las presiones de burbuja y rocío, el procedimiento en cada caso es similar. El análisis de esta opción se deja como ejercitación para el lector.

Cabe aclarar que, en general, las variaciones de K_i en función de la presión son más suaves que con respecto a la temperatura, por lo que salvo casos muy especiales, los algoritmos son más estables para el cálculo de las presiones de burbuja y rocío que para las temperaturas. Sin embargo, el error o tolerancia permitido debe ser mucho menor para introducir errores relativos tolerables.

Ejemplo:

Calcular la temperatura de burbuja y rocío de una mezcla cuya composición se brinda a continuación:

Componente	Composición	Cte. de Equilibrio ($K_{i,o}$)
X_1	0.25	2.00
X_2	0.25	1.20
X_3	0.25	2.20
X_4	0.25	4.20

Las constantes de equilibrio varían con la temperatura según las siguientes expresiones (simplificadas):

$K_1 = K_{1,0} + 0.08\ (T - T_0)$

$K_2 = K_{2,0} + 0.05\ (T - T_0)$

$K_3 = K_{3,0} + 0.1\ (T - T_0)$

$K_4 = K_{4,0} + 0.09\ (T - T_0)$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

con T_0 = 50 ºC, temperatura de referencia.

Se supone que en este caso las constantes no varían con la composición. Para la solución de este problema se debe aplicar la metodología ilustrada en las Secciones (IX.6.2) y (IX.6.3). Para ello, debe iterarse proponiendo una temperatura inicial, T_0, en este caso, *50 ºC* (ya que nos facilita los cálculos, se anulan los factores). Aplicando la Ecuación (25) y el método esquematizado en al Figura (IX.8), se tiene:

f(50) = 1.4

f´(50) = (f(51) - f(50))/1 = 1.48 - 1.4 = 0.08

$T_1 = T_0 - f(T_0)/f'(T_0) = 50 - 1.4 / (0.08) = 32.5$

f(32.5)= 0

Ello implica que *T = 32.5 ºC* es la solución buscada.

Para examinar la solución hallada analizamos el comportamiento de la función *f(T)* en la región de trabajo. En la Tabla (IX.2) se muestran, en la primer columna, los valores de la temperatura, en las siguientes, los factores parciales, mientras que en la última se indica la sumatoria, esto es, el valor de la función.

Tabla IX.2: Cálculo de la temperatura de burbuja.

T					F(T)
3	-0,440	-0,288	-0,625	-0,008	-2,360
4	-0,420	-0,275	-0,600	0,015	-2,280
5	-0,400	-0,263	-0,575	0,038	-2,200
10	-0,300	-0,200	-0,450	0,150	-1,800
20	-0,100	-0,075	-0,200	0,375	-1,000
30	0,100	0,050	0,050	0,600	-0,200
40	0,300	0,175	0,300	0,825	0,600
50	0,500	0,300	0,550	1,050	1,400
60	0,700	0,425	0,800	1,275	2,200
70	0,900	0,550	1,050	1,500	3,000
80	1,100	0,675	1,300	1,725	3,800

Los valores obtenidos pueden graficarse en función de la temperatura a los efectos de observar el punto en el cual se anula *f(T)*.

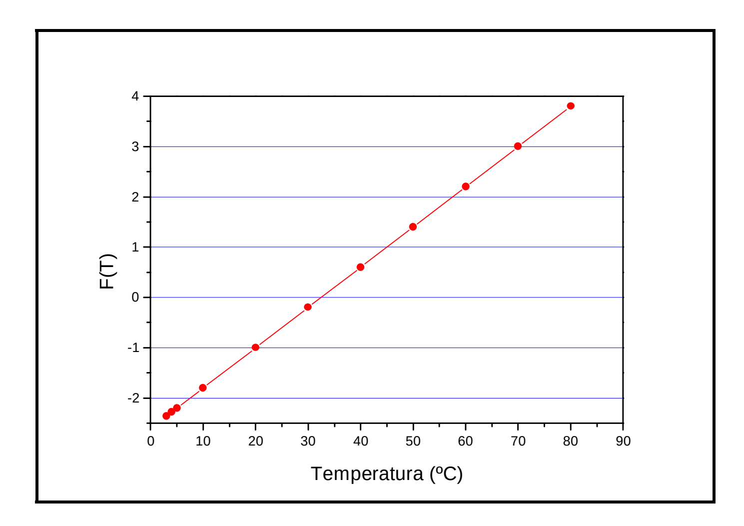
Es de destacar, al igual que en el ejemplo anterior, que aquí solo se ha pretendido mostrar el método de cálculo, por lo que los datos son simplificados. En

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

casos reales, existe una variación con la temperatura y la composición, incluso en casos particulares tanto del líquido como del vapor, lo cual exige un tedioso método de cálculo.

Además, para lograr convergencia, para problemas que involucran mezclas con componentes que tienen una muy marcada diferencia en sus volatilidades relativas, se debe recurrir a procedimientos específicos. Por ejemplo, en mezclas que contengan gases como el nitrógeno o el dióxido de carbono, se pueden presentar inconvenientes para la inicialización, convergencia, etc.

El cálculo de puntos de burbuja y rocío, como se verá más adelante, se utiliza permanentemente a lo largo del procedimiento iterativo para resolver equipos de separación multicomponentes en cascadas múltiple etapa. Es por ello que se requieren métodos efectivos y seguros.



Para obtener la temperatura de rocío el lector puede intentar el mismo camino seguido en el ejemplo.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Confeccionar el diagrama de flujos de un algoritmo que calcule la composición de la primera gota de líquido que se forma de una mezcla de vapor de composición y presión especificadas.

P2) Confeccionar el diagrama de flujos de un algoritmo que calcule la composición de la primer burbuja que se forma a partir de una mezcla líquida de composición y temperatura especificadas.

P3) Diagrame un algoritmo para el cálculo de la presión de burbuja de una mezcla de

composición y temperatura dadas.

P4) Ídem Problema (P3) para la presión de rocío (composición y temperatura especificadas).

P5) Dada una mezcla de composición ***x*** y las condiciones de presión y temperatura, diagrame un algoritmo para establecer la fase de dicha mezcla.

P6) Implemente un programa computacional utilizando cualquier lenguaje, por ejemplo FORTRAN, BASIC, PASCAL, C, etc., previo bosquejo de un diagrama de flujos de procedimientos que ejecute el algoritmo del Problema (P1). Suponga que posee subrutinas que calculan las propiedades fisicoquímicas a partir de la composición, temperatura y presión.

P7) Implemente en un programa computacional utilizando cualquier lenguaje, por ejemplo FORTRAN, BASIC, PASCAL, C, etc., para ejecutar el algoritmo del Problema (P2). Suponga que posee subrutinas que calculan las propiedades fisicoquímicas a partir de la composición, temperatura y presión.

P8) Suponga que desea confeccionar un módulo que represente a un nodo sumador. Esto es, ingresan *n* corrientes y sale una sola con las propiedades correspondientes a la suma de las mismas, según los balances de materia y energía. Suponga que no hay caídas de presión a través de equipo. Confeccione un diagrama de flujos para un programa computacional del módulo de referencia.
Nota: Debe considerar la posibilidad de tener más de una fase en la salida. Suponga que no hay reacción química y el sistema es adiabático y que todas las corrientes de entrada tienen la misma presión, que será la de salida. Suponga que dispone de subrutinas que le permiten calcular las propiedades fisicoquímicas, al igual que los programas desarrollados en los problemas previos.

P9) ¿Cómo plantearía un módulo de evaporación flash adiabático en el cual existe la posibilidad de reacciones químicas en la fase líquida? ¿Qué datos adicionales necesita?¿Cómo se modifica el balance de materia y energía? ¿Puede seguirse la misma estrategia indicada para el caso en que no existen reacciones químicas?

P11) Obtenga una ecuación similar a la Ecuación (17) pero utilizando la definición $\psi = L/F$, en lugar de θ:

a) ¿Puede obtener a partir de esta ecuación las expresiones para el el cálculo de la temperatura de burbuja y de rocío? ¿Qué debe cambiarse sobre el razonamiento basado en θ?

b) ¿Puede obtener a partir de la expresión hallada $f(\psi)$ la ya obtenida $f(\theta)$? Cómo debe procederse?

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

c) Resuelva alguno de los problemas anteriores utilizando *f(ψ)* en lugar de *f(θ)*.

P10) Suponga que el equipo funciona a una temperatura muy alta y pese a la aislación, las pérdidas de calor por convección, radiación y conducción son muy importantes. Suponga además que puede aproximar la cantidad de energía disipada según la siguiente expresión: $Q_p = U (T - T_a)$, donde Q_p es el calor disipado, T la temperatura del flash, y T_a la del ambiente. U es el coeficiente global de transferencia y se lo supone constante y dato. Implementar el algoritmo para el flash isotérmico y no isotérmico ("*adiabático*"), teniendo en cuenta este nuevo factor.

P11) Suponga que la mezcla de alimentación al flash tiene componentes con una gran diferencia de volatilidad respecto de los otros. ¿Cómo puede aprovechar este dato para la inicialización en el caso del flash isotérmico? ¿Puede ser útil también en el caso del flash adiabático?

P12) ¿Qué sucede cuando se plantea el cálculo de la temperatura de rocío y de burbuja en una mezcla líquida de tres componentes A, B y C, de composición X_A, X_B y X_C, respectivamente y a la presión P; si conocemos que en la fase líquida se desarrolla, a esas condiciones, la siguiente reacción química: $A + B \rightleftharpoons C$, con constante de equilibrio K_e, función de la T y la P del sistema, cuya expresión es un dato. ¿Son válidas las Ecuaciones (25) y (26)? De no ser válidas, ¿cómo debe procederse para el cálculo?

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Rachford, H. y J. D. Rice, J. Petr. Tech., Sect. 1, pág.19, Octubre 1952.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Henley, E. y J. D. Seader, *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, John Wiley & Sons, New York (1981).
- Holland, C. D., *Fundamentals of Multicomponent Distillation*, Mc. Graw-Hill, New York.
- King, J., *Separation Processes*, Mc. Graw-Hill, New York (1980).
- Mah, R. S. H y W. Seider W. Editors, *Foundations of Computer-Aided Chemical Process Desing*,Vol. I y II, Publicado por The Engineering Foundation, N.Y (1981).
- Pratt, H. R. C., *Countercurrent Separation Processes*, Elsevier Pub. Co., N.Y.
- Smith Buford, D., *Design of Equilibrium Stage Processes*, Mc. Graw-Hill Book Co., N.Y.
- Van Winkle, M., *Distillation*, Mc. Graw-Hill, New York (1969).

CAPÍTULO X

MODELADO DE EQUIPOS DE SEPARACIÓN MULTICOMPONENTES EN CASCADAS CONTRACORRIENTE MÚLTIPLE ETAPA

Por
Nicolás J. Scenna

X.1 INTRODUCCIÓN

Se han propuesto numerosos métodos para el modelado y simulación de procesos de separación en arreglos de múltiples etapas. En la mayoría de ellos deben utilizarse algoritmos computacionales ya que involucran sistemas de ecuaciones de elevada dimensión. El modelo matemático se desarrolla a partir de los balances de materia y energía y de las relaciones de equilibrio, pudiéndose complicar tanto como se desee, incluyendo términos como eficiencia de etapa, caídas de presión, reacciones químicas, mezclado en los platos, etc.

En general, la complejidad que plantean los modelos que contemplan efectos de mezclado, pérdidas de calor a través de las paredes y caídas de presión, entre otros factores, hacen dificultosa la resolución. Por esta razón se han propuesto modelos simplificados en mayor o menor grado.

Según conocemos, para modelar cualquier sistema, entre ellos los equipos de separación de mezclas multicomponentes, los ingenieros recurrimos a un modelo. También sabemos que pueden existir, para el mismo fenómeno a describir, varios modelos, según el conjunto de hipótesis y la estrategia de modelado seleccionada. Aquí esta situación se manifiesta con bastante claridad, según veremos.

En efecto, tradicionalmente a una columna de destilación o cualquier equipo de separación multicomponente se lo asocia a una cascada de etapas. En otros términos, los modelos tradicionales involucran *naturalmente* el concepto de etapas, que si bien parecen corresponderse aceptablemente a un equipo de bandejas o platos, no podemos afirmar lo mismo acerca de la alternativa tecnológica que emplea rellenos, cualquiera sea su tipo. Aquí el problema es que las corrientes de líquido y vapor fluyen en contracorriente intercambiando calor y materia en forma continua, no a tramos como lo impone el concepto de etapas, ya sean teóricas o afectadas por una eficiencia de separación (por ejemplo, de Murphree). Por lo tanto, para este caso, el concepto de etapas no parece el más natural, y no pocos problemas ha creado en el diseño de ciertos equipos el tratar de hacer corresponder los resultados de los modelos

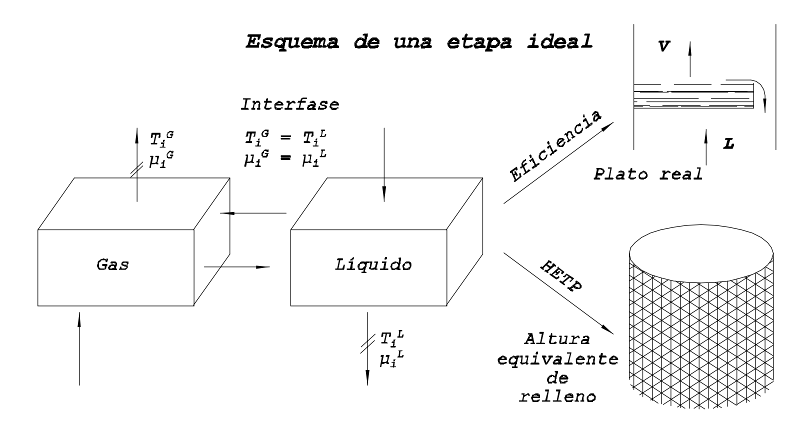
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

existentes (en la mayoría discretos o por etapas) con la realidad del sistema de relleno a utilizar en la columna. Esta situación puede explicarse en función de lo arraigado que históricamente se encontraba el concepto de etapas, en el momento de la aparición de la alternativa tecnológica basada en rellenos.

Para el modelado, la solución consistió en introducir el concepto de altura equivalente de relleno a la etapa teórica, o plato teórico, de tal manera de definir una equivalencia entre éste y el volumen de relleno que cumpliera la misma tarea de separación, aunque los mecanismos difusivos, de retención de líquido y/o gas, las pérdidas de carga, etc., respondieran a mecanismos totalmente diferentes para ambos casos.

Etapas de equilibrio

Este es un concepto acerca de un ente ideal, es decir, una etapa de equilibrio no tiene existencia física o real. Según el esquema, en la misma toman contacto dos (o más) corrientes (líquido-gas o por ejemplo líquido-líquido) y se asume que abandonan la misma en *estado de equilibrio*. Esto implica que el potencial químico de cada componente resulta equivalente, al igual que la temperatura.



Eficiencia de etapa

Dado que el concepto de etapa teórica es ideal, la conexión con los equipos reales viene dada por la introducción de ciertos parámetros. Para el caso de columnas de platos, como ya mencionamos, este parámetro es la definición de una eficiencia de separación, que vincula la composición (en el caso líquido-vapor) del vapor en equilibrio (ideal) con la composición que realmente se obtiene (composición de la corriente vapor de salida). Existen muchas maneras de realizar esta vinculación; la más conocida es la de Murphree (aunque no necesariamente la más conveniente), y será utilizada en los modelos que veremos más adelante.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Para el caso de equipos de contacto continuos a través de relleno, ya vimos que se introduce el concepto de altura equivalente de plato teórico (AEPT), o en inglés (HETP -Height Equivalent to a Theoretical Plate-). La experiencia indica que ambos conceptos pueden manejarse con cierta facilidad desde el punto de vista teórico solo en mezclas binarias. La estimación de la eficiencia de Murphree para mezclas multicomponentes es muy dificultosa, y en general, para mezclas de comportamiento fuertemente no ideal, en las cuales la pendiente de la curva de equilibrio cambia abruptamente, los resultados de los modelos existentes para estimarla pueden involucrar inconsistencias (por ejemplo eficiencia infinita). Además, por definición, existe la posibilidad de un resultado mayor a la unidad, lo cual para un valor de eficiencia resulta difícil de *digerir*, aunque solo se trate de un problema de la forma en que ha sido definida. Pese a todos estos inconvenientes, se la utiliza con frecuencia, ya que en la mayoría de los casos se recurre a valores experimentales, y se sabe que generalmente está acotada en el rango [*0.65 - 0.75*], a través de la experiencia desarrollada luego de muchas mediciones en la industria petroquímica, ya que como puede imaginarse, hay un gran número de columnas funcionando que nos proveen datos útiles.

El problema se presenta para sistemas que involucren mezclas nuevas, ya que aquí debe estimarse un valor (que como vimos es dificultoso), o bien realizarse experiencias en laboratorio (lo más aconsejable). Dentro de este contexto, si bien rigurosamente la eficiencia varía plato a plato, y para cada componente en la mezcla, dadas las dificultades expuestas, se la supone constante a lo largo de toda la cascada, y además, salvo raras ocasiones, no se considera un valor distinto para cada componente, sino que se trabaja con el concepto de eficiencia global, esto es, un valor único para todos ellos, y por lo general, se lo asume también igual para todas las etapas. Es por ello que debe tenerse cuidado cuando se enfrenta la tarea de interpretar los resultados de una simulación, porque estos dependerán fuertemente de las hipótesis realizadas, y entre ellas, las relacionadas con la eficiencia de separación.

Para el caso de columnas rellenas ocurre el mismo fenómeno. Puede manejarse adecuadamente el concepto de HEPT para mezclas binarias pero no para multicomponentes. Además, en ambos casos debe considerarse el efecto de la no idealidad del flujo, los efectos de arrastre, llorado, inundación, retroflujo, etc. Los modelos para estimar estos factores resultan muy complicados, y en general no son tenidos en cuenta analíticamente, sino por medio de factores correctores, a tener en cuenta en el diseño. Por ejemplo el problema de la distribución de gas o líquido en una columna rellena, y las canalizaciones en los platos para columnas de destilación.

En síntesis, nunca el flujo de vapor responde al flujo pistón y el del líquido en el plato es transversal al mismo, resultando una mezcla perfecta, sino todo lo contrario. Para rellenos, tampoco se logra el flujo casi ideal que nos presentan ya sean las ecuaciones o los experimentos de laboratorio a baja escala. No obstante ello, en los modelos generalmente en uso se considera ambas fases fluyendo en mezcla perfecta,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

esto es, se necesita solo un parámetro (parámetros concentrados) para describir el fenómeno. De lo contrario deberíamos recurrir al uso de derivadas parciales en las direcciones espaciales.

Dejando de lado los problemas del flujo para concentrarnos en el modelado de la etapa de equilibrio, se desprende que para equipos de contacto continuo resulta más natural plantearse un modelo de transferencia de materia y energía continuo, y no por tramos. Esto puede realizarse mediante un modelo que contemple los fenómenos de transferencia de calor y materia a través de la interfase. De esta manera, pueden introducirse fácilmente los efectos del flujo no ideal, y el apartamiento del equilibrio en los fenómenos de transferencia, si se lo necesita.

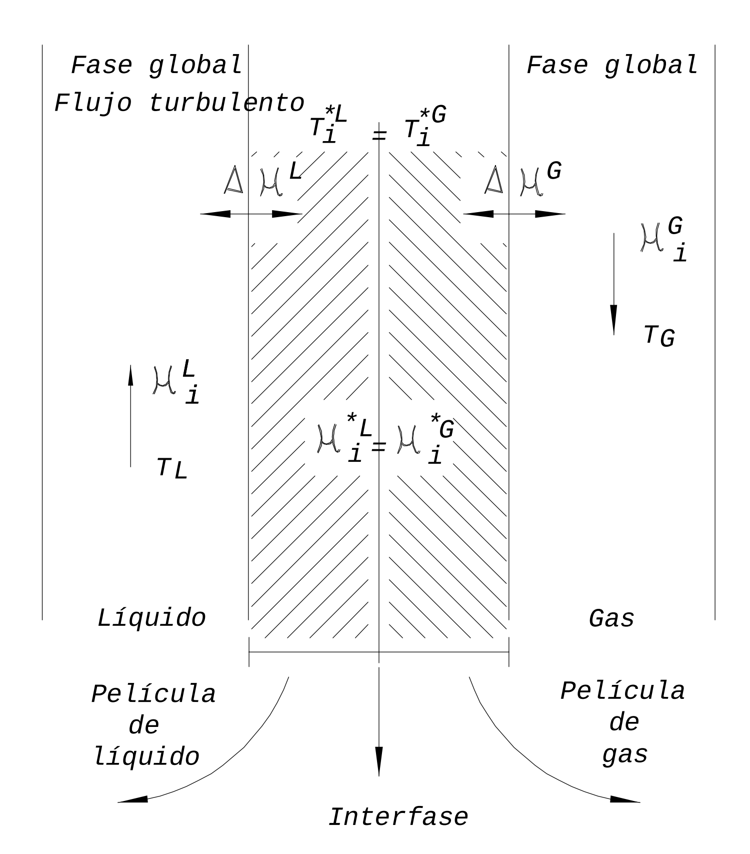
En un modelo de este tipo, o de no-equilibrio, debemos modelar el flujo de materia por medio de leyes que gobiernan el proceso de difusión de un componente en un mezcla multicomponente, por ejemplo la ley de Fix, o más correctamente, la de Maxwell-Stefan. En efecto, esta última expresa que el flujo de un componente en la mezcla puede aproximarse como proporcional a la fuerza impulsora (gradientes de potenciales químicos). El factor de proporcionalidad es en realidad una función que contiene la información de la no idealidad de la mezcla, y la interacción de cada componente con los demás, teniendo en cuenta, si se dispone de información, de los efectos relativos de difusión de cada elemento respecto de la mezcla.

De esta forma, en un modelo de este tipo, el perfil de composiciones y temperaturas en función de la longitud recorrida surgirá del cálculo, al igual que las alturas equivalentes de etapa teórica, las cuales ahora no son necesarias como datos, sino que se transforman en una salida del modelo. Un modelo de este tipo necesita para su implementación, entre otras propiedades, de la estimación de las constantes de equilibrio (para determinar las concentraciones en la interfase), entalpías, las constantes de transferencia de materia para cada componente (considerando la no idealidad de la mezcla y la interacción entre los componentes en la misma), para lo cual necesitamos viscosidades, difusividades, coeficientes de fricción, densidades, área por unidad de volumen, tensión superficial, etc.

Este tipo de modelo, como se ha dicho, es más adecuado para simular equipos de contacto; sin embargo requiere muchas más estimaciones de propiedades fisicoquímicas que los modelos clásicos de equilibrio.

Por otra parte, cualquiera sea el modelo, si se consideran efectos de flujo deberán contemplarse factores geométricos, como se verá para el caso de columnas de plato en el Capítulo XV.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



Dentro de este contexto podríamos concluir en que debido a una tendencia histórica , o de conveniencia por la disponibilidad de los modelos, aquellos basados en la hipótesis de equilibrio son los más desarrollados y utilizados al presente (aunque esto no quiere decir que sean los más convenientes), disponiéndoselos en todos los simuladores comerciales que se ofrecen en el mercado. Más aún, y más importante, son los que se enseñan mayoritariamente en la carrera de ingeniería química.

No obstante, esto cambiará en un futuro cercano. Ya son muchos los algoritmos existentes (también en simuladores comerciales) bajo la óptica del *no-equilibrio*. Seguramente se incrementará su uso progresivamente.

Para una descripción más detallada de este enfoque pueden consultarse los trabajos de Wesselingh y Krishna (1980), Taylor y Krishna (1993) y Wesseling (1997).

Dada esta breve introducción, en el resto del capítulo, al igual que en el Capítulo XV, analizaremos modelos basados en el concepto de etapas de equilibrio.

Simulación de cascadas múltiple-etapa basado en el concepto de etapas de equilibrio

La simulación rigurosa de un proceso de separación en contracorriente de múltiples etapas en estado estacionario utilizando los modelos basados en etapas de equilibrio implica resolver un sistema de ecuaciones algebraicas no lineales. Este sistema consiste básicamente de cuatro conjuntos de ecuaciones que son los balances de materia, relaciones de equilibrio, balances de energía y suma de las fracciones molares. Estas ecuaciones comúnmente se designan como ecuaciones MESEN (Masa, Equilibrio, Suma y Energía) y pueden ser escritas en estado transitorio o estacionario (MESH -Mass, Energy, Summation and Enthalpy- como se conoce en la literatura inglesa).

Se han propuesto numerosos algoritmos para resolver el problema de destilación multicomponente pero la experiencia ha demostrado que la eficiencia o conveniencia de un método particular varía de problema a problema. Entre otros pueden mencionarse los trabajos referenciados en la sección de citas bibliográficas. Por ejemplo, debe decidirse si las ecuaciones MESEN habrán de ser satisfechas para cada etapa simultáneamente (agrupamiento por etapas) o se resolverán todos los tipos simultáneamente para todas las etapas (asignación por tipo de ecuación). Casi todos los métodos publicados difieren principalmente en el método usado para resolver el sistema y en la forma de agrupar las ecuaciones (particionado).

Como hemos visto, luego de plantear las ecuaciones de balance y demás relaciones, la siguiente etapa en el modelado, consiste en contabilizar el número total de variables (número de incógnitas del sistema de ecuaciones algebraicas) y todas las restricciones o relaciones del sistema equivalentes al número de ecuaciones independientes que puedan plantearse. Sea N_v el número total de variables y N_e el número de ecuaciones independientes. Si el número de ecuaciones iguala al número de incógnitas tenemos un sistema compatible. Ya hemos observado que normalmente el número de variables es superior al número de relaciones y deben especificarse arbitrariamente: $N_d = N_v - N_e$ variables, frecuentemente denominadas variables de diseño. Las variables particulares que se especifican varían de un tipo de problema a otro. No obstante, independientemente de las restricciones o datos físicos disponibles, vimos en el Capítulo IV que existen métodos para seleccionar las variables a especificar de tal forma de lograr una secuencia de resolución conveniente.

En general, los métodos utilizados para resolver el sistema de ecuaciones que resulta de plantear el modelo matemático pueden agruparse según el siguiente esquema:

- Métodos aproximados.
- Métodos de cálculo etapa a etapa (generalmente simplificados).
- Métodos semi-rigurosos.
- Métodos de resolución simultánea (rigurosos).
- Métodos de relajación (rigurosos).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

X.2 MÉTODOS DE RESOLUCIÓN APROXIMADOS

Los métodos simplificados son procedimientos sencillos desarrollados para relacionar las corrientes que entran y salen con el número de etapas de equilibrio especificadas. Se llaman así debido a que implican un tratamiento global de las etapas sin considerar detalladamente los cambios de temperatura y composición en cada una de ellas (no se calculan perfiles internos).

Generalmente se adoptan caudales constantes de etapa a etapa o volatilidad relativa (α_{ij}) constantes entre los componentes presentes. Debido a las muchas suposiciones, estos métodos deben aplicarse con precaución. Por ejemplo, tanto la ecuación de Fenske para mínimo número de etapas como la ecuación de Underwood para reflujo mínimo se basan en la separación de componentes claves. Ambos métodos suponen volatilidades relativas constantes (a las condiciones promedio). De la misma manera se utiliza la correlación de Gilliland.

El uso tradicional de estas ecuaciones en diseño, como hemos comentado, generalmente consiste en determinar el mínimo número de etapas, N_{min}, por Fenske, el mínimo reflujo con la ecuación de Underwood (R_{min}) y luego utilizar la relación entre etapas y reflujo (dado el reflujo y las etapas mínimas) -ecuación de Gilliland- para calcular los valores óptimos. Muy a menudo se evita este problema de optimización en diseños preliminares utilizando el heurístico $R = 1.15\ R_{min}$ y $N = 2\ N_{min}$. No obstante, debe tenerse cuidado ya que los factores pueden cambiar con el tiempo, ya que dependen de variables contingentes o coyunturales; esto es, no surgen de los primeros principios.

Además, para mezclas no ideales, donde los valores de las constantes de equilibrio son altamente dependientes de la composición, el valor seleccionado como promedio generalmente no representa las condiciones promedio de la columna. Aún en sistemas de destilación binaria para casos no ideales, el uso de métodos aproximados da lugar a grandes errores.

Para sistemas relativamente ideales, pero cuyos componentes difieran bastante en volatilidad, las suposiciones pueden dar lugar a errores considerables, pero ya que tales sistemas son fácilmente separables y requieren pocas etapas, el error puede que no sea importante desde el punto de vista práctico. Para separaciones dificultosas o bien para altas purezas, lo contrario es válido.

Los métodos aproximados continúan utilizándose para varios propósitos como ser diseños preliminares, estimaciones rápidas, estudios paramétricos para establecer las condiciones óptimas de diseño, para estudiar el efecto de la relación de reflujo sobre los costos de inversión y operación, etc. Sin embargo, debe advertirse que existen otros métodos más adecuados para la estimación de mínimo reflujo y mínimo número de etapas; eficientes también para problemas que involucren mezclas no-ideales; y que deben ser tenidos en cuenta a la hora de tratar tales sistemas (ver, por ejemplo, Levy y col., 1987; Koehler y col., 1991).

X.3 MÉTODOS DE ETAPA A ETAPA

Estos algoritmos obtienen una solución que incluye todas las condiciones en cada etapa, así como las propiedades de los productos.

Se parte fijando las condiciones en una cierta etapa de la cascada y se calcula el resto mediante un adecuado procedimiento repetitivo. Generalmente son las etapas de tope y fondo aquellas cuyas condiciones se conocen o pueden estimarse más fácilmente. Consecuentemente los cálculos se realizan etapa por etapa desde ambos extremos de la columna hasta el plato de alimentación o de un extremo al otro. En ambos casos deben corresponderse las composiciones y condiciones calculadas con las conocidas o estimadas. En consecuencia debe establecerse un criterio de comparación. La solución del problema se alcanza cuando se satisface este criterio, es decir se logra la convergencia.

Los métodos etapa a etapa son útiles cuando se desea conocer el número de etapas bajo condiciones de alimentaciones conocidas para una dada separación. Ejemplos clásicos de procedimientos etapa a etapa son los de Lewis-Matheson (1932) y Thiele-Geddes (1933), muy utilizados para cálculos manuales a partir de su aparición. A nivel de cada etapa se procede a aplicar algoritmos similares a los propuestos para el flash en el Capítulo IX. El principal problema de estos métodos radica en la acumulación de errores que se produce a través de la solución de las distintas etapas, y la inestabilidad para la convergencia. Este problema se potencia para mezclas altamente no ideales, y cuando se incrementa el número de componentes y/o de etapas. En la actualidad son poco utilizados, debido a la facilidad con que pueden resolverse los métodos semi-rigurosos o rigurosos mediante algoritmos implementados en computadora.

El método de Lewis-Matheson es un procedimiento iterativo en el cual se toma como grado de libertad el número de etapas, especificando la separación deseada de dos componentes claves, la relación de reflujo, la presión en la columna y la localización del plato de alimentación. Se parte inicialmente suponiendo las composiciones de cabeza y fondo; realizándose cálculos etapa a etapa desde ambos extremos de la columna hasta la etapa de alimentación, donde las relaciones de los componentes claves deben coincidir.El balance de materia en el plato de alimentación sirve como criterio de convergencia. Si el balance no se satisface las estimaciones de las composiciones de tope y fondo deben ajustarse y repetir el cálculo.

En una destilación multicomponente normalmente se conocen o se definen como máximo dos componentes en los productos de acuerdo a las especificaciones del problema. Si el sistema presenta valores razonablemente constantes de volatilidades relativas, la separación de los otros componentes puede estimarse con buena precisión. En cambio si el sistema es altamente no ideal, la composición de los productos no puede estimarse adecuadamente y el cálculo se complica, debido a los problemas de convergencia.

Las únicas variables de iteración que deben asumirse en el método de Lewis-

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Matheson (1932) son las fracciones molares o caudales de los componentes en los extremos. Las temperaturas de etapa y caudales de cada fase pueden obtenerse por cálculos iterativos. Resulta más conveniente sin embargo proponer un perfil inicial de temperatura y de caudales, calcular las composiciones de etapa y luego usar éstas para calcular nuevos perfiles de temperatura y caudales. Se requiere entonces de un lazo de iteración interna y otro externo. Las variables de iteración del lazo externo son las fracciones molares o caudales de los componentes no clave en los productos, ya que la separación de los componentes claves es una especificación del problema. Las variables de iteración del lazo interior son los caudales entre etapas de vapor o líquido. Muchas veces se simplifican los cálculos suponiendo caudales constantes en ambas secciones de la columna. Esto es relativamente cierto cuando hay poco cambio entálpico; es decir el sistema es aproximadamente ideal.

El método fue desarrollado para fraccionadores simples, con una alimentación y dos productos, aunque existen extensiones para contemplar múltiples alimentaciones y extracciones laterales. Implementado sobre un computador digital frecuentemente ha probado ser numéricamente inestable sobre todo para múltiples alimentaciones y corrientes laterales de salida y susceptible de producir importantes errores de redondeo o truncamiento.

El método de Thiele-Geddes (1933), por otra parte, necesita especificar el número de etapas de equilibrio por encima y por debajo de la alimentación, la relación de reflujo y el caudal de destilado, presión de la columna, y la composición y condiciones de la alimentación. El perfil de temperaturas y los caudales de vapor o líquido entre etapas son las variables de iteración que deben asumirse inicialmente. Los balances de materia se resuelven para cada etapa partiendo desde un extremo de la columna hacia el otro o desde ambos extremos hacia la etapa de alimentación. El perfil de temperaturas se corrige luego solucionando las ecuaciones de sumatoria de composiciones y finalmente los caudales de etapa se ajustan mediante el balance de energía. El procedimiento se repite hasta que todas las ecuaciones se satisfacen. El método de Thiele-Geddes también ha mostrado frecuentemente ser numéricamente inestable, cuando se intenta resolverlo con un computador digital. Existen numerosas propuestas para mejorarlo. Se logra convergencia más rápida, o los datos obtenidos son más confiables; aunque básicamente los métodos etapa por etapa son inaplicables para columnas complejas.

En general, tanto los métodos simplificados como los procedimientos etapa a etapa fueron propuestos antes de la *masificación* de los métodos de solución numérica implementados computacionalmente. Es por ello que en esta obra sólo se los menciona a los efectos de introducirlos conceptualmente.

Una visión más acabada puede obtenerse en cualquiera de los clásicos textos de procesos de separación, tales como Smith (1963), Pratt (1967), King (1980), Holland (1981) y otros.

Se aconseja al estudiante realizar un repaso de tales métodos a los efectos de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

fijar conceptualmente los fundamentos de esta operación unitaria, antes de profundizar los algoritmos numéricos que se analizan a continuación.

X.4 MÉTODOS MATRICIALES DE RESOLUCIÓN (SEMI-RIGUROSOS). MODELO MATEMÁTICO

Como en todos los casos, para plantear el sistema de ecuaciones correspondiente deben adoptarse un conjunto de hipótesis y plantearse los balances habituales.

Aquí supondremos etapas ideales, sistema aislado (se desprecian las pérdidas energéticas) que no existen reacciones químicas y que existe sólo una fase líquida y una vapor. En función de las hipótesis adoptadas, las expresiones matemáticas que describen un proceso de separación en contracorriente son las siguientes (ver Figura (X.1)):

Relaciones de equilibrio (N x NC):

$$y_{i,\,n} = K_{i,\,n}\, x_{i,\,n} \quad con\ i = 1,\ ...,\ NC\ ;\ n = 1,\ ...,\ N$$

de donde:

$$E_{i,\,n} = y_{i,\,n} - K_{i,\,n}\, x_{i,\,n} = 0 \tag{1}$$

donde *N* es el número de etapas y *NC* el número de componentes. Los índices *i* y *n* representan dichas variaciones, ya que adoptan los valores desde el uno hasta el número de componentes o etapas respectivamente. Por lo tanto, en cada variable el subíndice *n* indica que pertenece a la etapa *n*, mientras que el subíndice *i* refleja una propiedad asociada al componente *i = 1, 2, ..., NC* respectivo.

Por último, en nuestra regla de nomenclatura, con una variable con dos subíndices, por ejemplo $x_{i,n}$, se designa la composición *x*, del componente *i*, en la etapa *n*. Una consecuencia inmediata de esta notación es que si bien la Ecuación (1) es expresable en una única línea, en realidad, de una manera similar a lo visto para el equipo de evaporación flash, pero ahora en dos dimensiones, representa un arreglo o sistema de ecuaciones de dimensión (*N x NC*). Esto es, el número de etapas por el número de componentes.

Balance de materia para cada etapa y cada componente (N x NC ecuaciones) (Se asume que no existen reacciones químicas):

$$\begin{aligned} M_{i,n} = {} & L_{n-1}\, x_{i,n-1} - (L_{i,n} + SL_{i,n})\, x_{i,n} \\ & - (V_n + SV_n)\, y_{i,n} + V_{n+1}\, y_{i,n+1} + F_n\, z_{i,n} = 0 \end{aligned} \tag{2}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde SL_n y SV_n son los caudales molares de extracción de líquido y vapor respectivamente.

Balance de energía en la etapa n (N ecuaciones):

$$\begin{aligned} EN_n &= L_{n-1}\ HL_{n-1} - (L_n + SL_n)\ HL_n - (V_n + SV_n)\ HV_n \\ &+ V_{n+1}\ HV_{n+1} + F_n\ HF_n + Q_n = 0 \end{aligned} \tag{3}$$

donde HL, HV y HF son entalpías específicas y Q_n el calor adicionado/extraído en la etapa n.

Restricción sobre las fracciones molares -suma de las fracciones molares- (2 x N ecuaciones):

$$SX_n = \sum_{i=1}^{NC} x_{i,\,n} - 1 = 0 \tag{4}$$

$$SY_n = \sum_{i=1}^{NC} y_{i,\,n} - 1 = 0 \tag{5}$$

con $n = 1, ..., N$.

Se deben considerar, además, las relaciones para calcular las constantes de equilibrio K y las entalpías de líquido y vapor, HL y HV. Estas relaciones pueden expresarse en forma funcional como sigue:

$$K_{i,n} = K_{i,n}\ (P_n, T_n, x_{i,n}, y_{i,n})$$

$$HL_n = HL_n\ (P_n, T_n, x_{i,n})$$

$$HV_n = HV_n\ (P_n, T_n, y_{i,n})$$

Planteadas todas las ecuaciones, debemos proceder a encontrar un método de resolución del sistema resultante. Resulta claro que las Ecuaciones (2) representan un sistema de $N \times NC$ ecuaciones al que deben adicionarse las N Ecuaciones (3) del balance de energía, además de las expresiones funcionales para entalpías, constante de equilibrio, restricciones de sumatoria de fracciones molares, expresadas por los Sistemas de Ecuaciones (1), (4), (5) y demás.

Si se piensa que una torre de destilación con *30 etapas* y *15 componentes* es común en petroquímica, se deduce rápidamente la dimensión del sistema a resolver, que por otra parte para mezclas no ideales es altamente no lineal.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En los Capítulos III y IV se discutieron algunos métodos numéricos para resolver sistemas de ecuaciones de elevada dimensión. En todos ellos se utiliza, como vimos, el álgebra matricial.

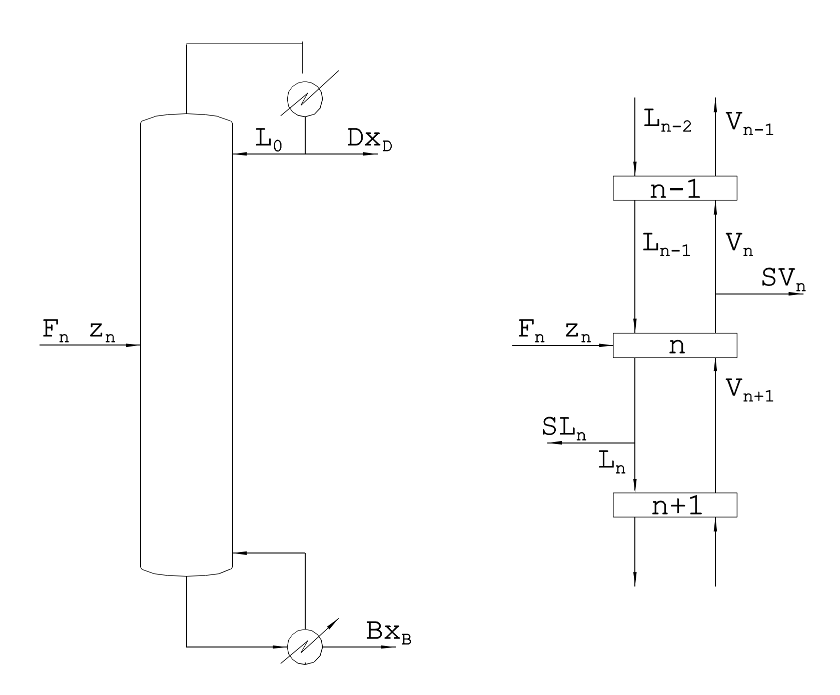


Figura. X.1: Diagrama esquemático de una columna de destilación. Las etapas se enumeran del tope (1) al fondo (N).

Dentro de este contexto, se han propuesto numerosas estrategias para encarar la solución, válidas algunas para casos particulares, siendo otras más generales. A continuación discutiremos someramente algunas de ellas.

Por ejemplo, podemos obtener un sistema matricial compacto, y de forma adecuada para su tratamiento matemático, mediante un reagrupamiento de ecuaciones. En efecto las Ecuaciones (1) pueden usarse para eliminar los y_{in} en las Ecuaciones (2) y (3). Por otra parte, si planteamos un balance global entre el tope y el plato n obtenemos (ver Figura (X.2)):

$$L_n = V_{n+1} + \sum_{k=1}^{n} (F_k - SV_k - SL_k) - D \qquad (6)$$

con $D = V_1$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A partir de las Ecuaciones (2), eliminando los y_i por medio de las Ecuaciones (1) pueden ahora eliminarse los L_n mediante la Ecuación (6).

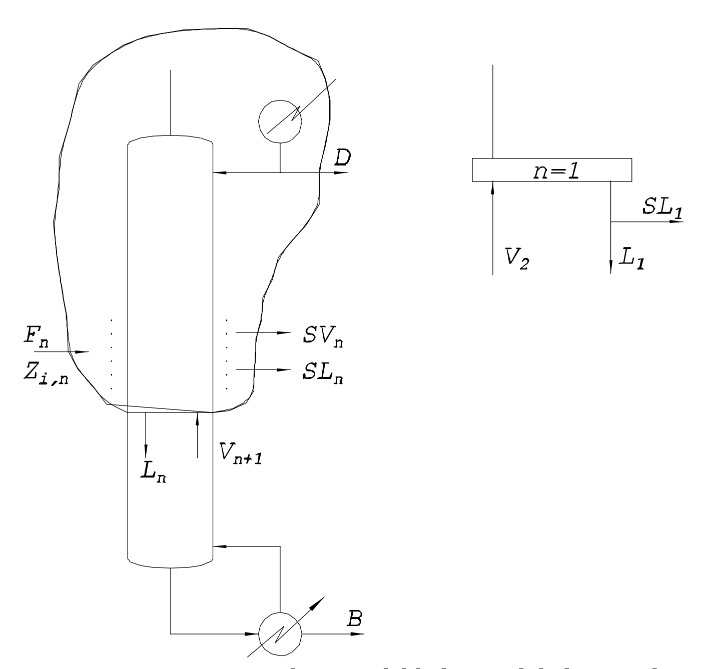


Figura X.2: Esquema indicativo del balance global entre el tope y la etapa N.

De esta manera, queda un sistema cuyas variables son sólo $x_{i,n}$ y V_n. Esto es, un sistema de (N x NC +N) ecuaciones e incógnitas luego de especificar las siguientes variables:

Número de platos (N)

Localización y condición de todas las alimentaciones (F_n)

Localización de las extracciones laterales (SV_n, y SL_n)

Caudal de destilado (D)

Relación de reflujo (R)

Presión de operación (P_n)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Debido a la no linealidad y complejidad de estas ecuaciones, una solución analítica es imposible y deben usarse procedimientos numéricos o iterativos.

En efecto, el resultado de las manipulaciones algebraicas anteriores nos brinda la posibilidad de tratar al sistema en forma de expresión matricial, que como ya sabemos, puede fácilmente resolverse mediante métodos numéricos apropiados; y más específicamente, el propuesto por Thomas para matrices tridiagonales. Para ello, luego de reemplazar las expresiones anteriormente obtenidas en las ecuaciones a resolver, se debe proceder a un reordenamiento algebraico, cuyo resultado nos permite escribir al sistema anterior de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_2 & B_2 & C_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & A_3 & B_3 & C_3 & 0 & 0 \\ 0 & . & . & 0 & . & . \\ 0 & . & . & A_{N-1} & B_{N-1} & C_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{i,1} \\ x_{i,2} \\ x_{i,3} \\ . \\ x_{i,N-1} \\ x_{i,N} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ . \\ D_{N-1} \\ D_N \end{bmatrix} \qquad (7)$$

Debe resaltarse que cada elemento x_{in} representa la composición del componente *i* en cada etapa, por lo que existirá una ecuación matricial como la anterior para cada componente, x_1 , x_2, ..., x_{NC}, conteniendo cada una de ellas todos los valores pertenecientes a cada etapa genérica *n*.

En síntesis, debe solucionarse NC veces el sistema anterior para hallar el perfil de composiciones de cada componente a lo largo de toda la columna.

Los coeficientes A_n, B_n y C_n representan en forma compacta las siguientes relaciones:

$$A_n = V_n + \sum_{k=1}^{n-1} (F_k - SV_k - SL_k) - SL_1 - V_1 \qquad (8)$$

$$con\ 2 \leq n \leq N$$

$$-B_n = \sum_{k=1}^{n} (F_k - SV_k - SL_k) - V_1 + SL_n + (V_n + SV_n)\, K_{i,n} + V_n \qquad (9)$$

$$con\ 1 \leq n \leq N$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$C_n = V_{n+1} \, K_{i,n+1} \; ; \; 1 \leq n \leq N-1 \qquad (10)$$

$$D_n = -F_n \, z_{i,n} \; ; \; 1 \leq n \leq N \qquad (11)$$

con $x_{i,o} = 0$, $V_{N+1} = 0$, $SV_1 = 0$, y $SL_N = 0$

Se observa que los coeficientes B_n y C_n *dependen de* V_n y T_n (caudal de vapor y temperatura de cada etapa, respectivamente) y también de la *composición* a través de la constante K. Si la funcionalidad de K es independiente de la composición (sólo depende de Tn) y se asumen los valores de V_n y T_n (variables de iteración), el sistema no lineal se convierte en uno lineal.

Para la resolución de la matriz tridiagonal a fin de obtener los valores x_{in} puede utilizarse el algoritmo de Thomas altamente eficiente para este caso, según vimos en el Capítulo IV. Obtenidos los valores de las fracciones molares del líquido, se reemplazan en la ecuación de suma para las fracciones molares del vapor:

$$S_{y,n} = \sum_{i=1}^{NC} y_{i,n} - 1 = 0 \qquad (12)$$

y considerando:

$$y_{i,n} = K_{i,n} \, x_{i,n}$$

Se tiene:

$$S_{y,n} \, (x_{i,n} \, , \, T_n) = \sum_{i=1}^{NC} K_{i,n} \, x_{i,n} - 1 = 0 \; ; \; 1 \leq n \leq N \qquad (13)$$

Si los valores de $K_{i,n}$ son independientes de la composición, la Ecuación (13) puede expresarse como una función de T solamente. Esta ecuación no lineal en T puede resolverse por algún método iterativo como el de Newthon-Raphson, Muller, falsa posición, etc. Del sistema de Ecuaciones (6) pueden obtenerse los L_n, y del Sistema (7) los valores $x_{i,n}$. Debe remarcarse que el cálculo debe realizarse para *cada componente i = 1, ..., NC*, es decir, el Sistema Matricial (7) debe resolverse *NC* veces para lograr las composiciones x_{in} para todos los componentes *i* en todos los platos *n*.

Una vez calculados los valores de T_n a partir de la Ecuación (13), los nuevos valores de V_n pueden calcularse directamente del balance de energía. El cálculo se repite hasta que se alcanza un criterio de convergencia preestablecido; por ejemplo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\sum_{n=1}^{N} \left[T_n^k \; - \; T_n^{k-1} \right]^2 \; \leq \; \delta_T \tag{14}$$

$$S_N \; = \; \sum_{n=1}^{N} \left[\sum_{n=1}^{NC} K_{i,n} \; x_{i,n} \; - \; 1.0 \right]^2 \; \leq \; \delta_s \tag{15}$$

siendo δ_T y δ_s las tolerancias preestablecidas y k el número de iteraciones.

En la Figura (X.3) se muestra el procedimiento de resolución. El esquema aquí bosquejado corresponde al método denominado de punto de burbuja (Wang y Henke,1966), porque en cada iteración se calcula un nuevo conjunto de temperaturas de etapa a partir de las ecuaciones del punto de burbuja.

Friday y Smith (1964), mostraron que los cálculos de punto de burbuja para temperatura de etapa son particularmente efectivos para mezclas que tengan puntos de ebullición cercanos. En ellas, pequeñas variaciones de la temperatura afectan en forma sensible los caudales de vapor. En este caso, el balance de energía es utilizado para calcular los caudales de vapor. Esto es, la separación está dominada por el equilibrio de fases y no por el balance de energía. Este es el caso más frecuente en problemas de destilación y también en problemas de extracción líquido-líquido.

Para mezclas que presentan diferencias grandes en los puntos de ebullición de sus componentes, los caudales de líquido o vapor permanecen aproximadamente constantes en un intervalo relativamente grande de variaciones de temperatura, ya que en este caso están prácticamente determinados por los coeficiente de distribución. Esta característica es común en operaciones de absorción y desorción y se dice que están dominados por el balance de energía (el balance de energía es mucho más sensible a las temperaturas de etapa que a los caudales inter-etapa).

El balance de energía se usa para corregir la temperatura y la Ecuación (13) para modificar los caudales de vapor (implica que el lazo externo es temperatura y el interno caudales de vapor). Este método se denomina *suma de caudales*. Las especificaciones son las mismas que para el método del punto de burbuja y las variables de iteración.

El cálculo parte de valores de T_n y V_n asumidos; se calculan los valores de x_{in} resolviendo la matriz tridiagonal por el algoritmo de Thomas pero los valores obtenidos; sin normalizar, son usados para producir nuevos valores de L_n mediante la siguiente ecuación:

$$L_n^{(k+1)} \; = \; L_n^{(k)} \; \sum_{i=1}^{NC} x_{i,n} \tag{16}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

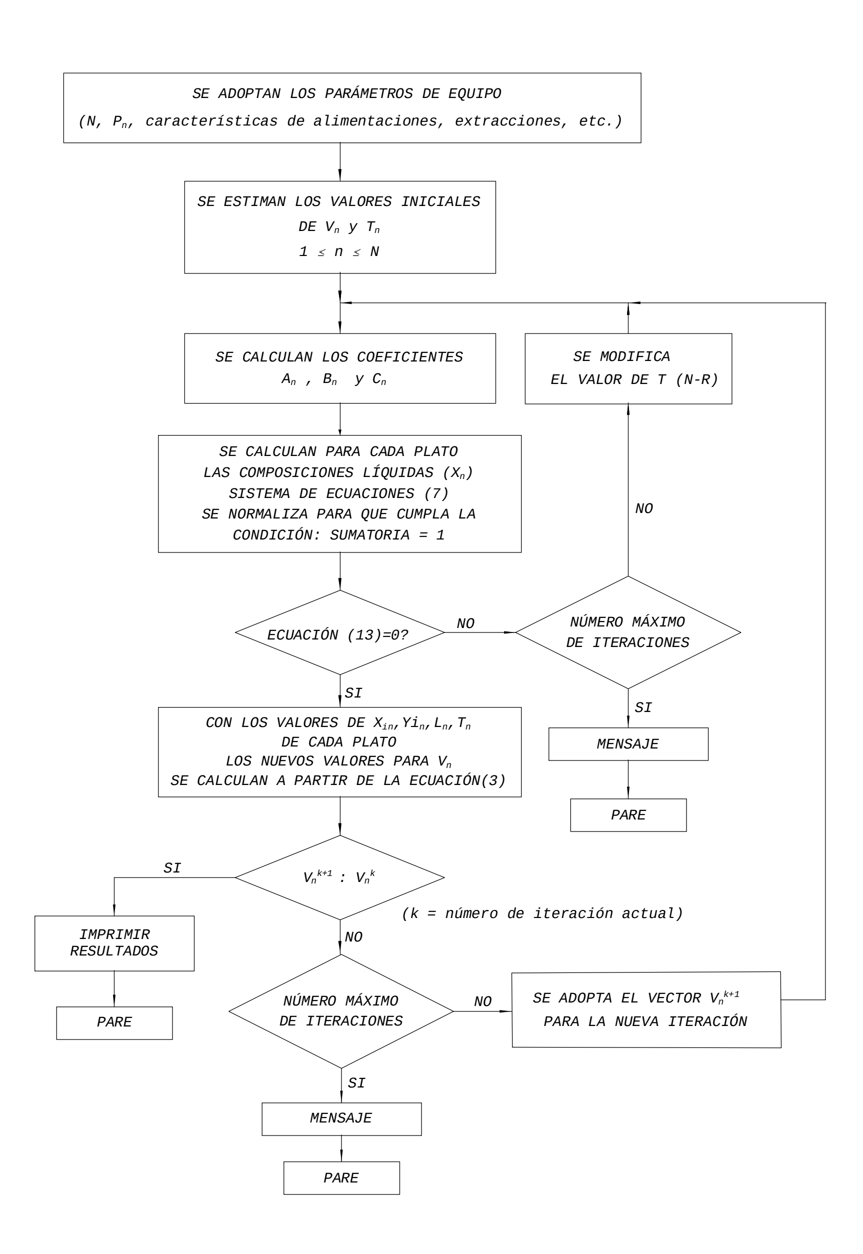


Figura X.3: Esquema lógico de resolución. Método semi-riguroso (válido para sistemas ideales).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Los valores de $L_n^{(k)}$ se obtienen de los valores de $V_n^{(k)}$ dados por el balance global de materia provenientes del balance de cáscara indicado en las Ecuaciones (6).

Los valores de V_n^{k+1} se obtienen del balance global de materia (sumando las ecuaciones (2) para todos los componentes), y luego realizando un balance de cáscara entre la etapa n y N según vimos para el caso anterior. Las temperaturas T_n^{k+1} se obtienen resolviendo simultáneamente las ecuaciones del balance de energía para todas las etapas (por N-R).

Si se resuelven simultáneamente las ecuaciones de energía (Ecuaciones (3)) y suma (Ecuación (13)), el algoritmo puede aplicarse para ambos tipos de problemas, esto es, mezclas cuyos componentes difieren mucho en sus puntos de ebullición (absorción) y mezclas cuyos componentes tengan puntos de ebullición cercanos (destilación).

De esta manera, también pueden resolverse casos intermedios para los cuales frecuentemente fallan tanto el método del punto de burbuja como el de suma de caudales. Por ejemplo, las torres demetanizadoras frecuentemente tienen características de un sistema de absorción en una parte de la columna y de destilación en otra. Estos casos pueden resolverse satisfactoriamente por métodos como el de Tomich (1970) que corrigen simultáneamente a los caudales V_n y a las temperaturas T_n. Tomich propone el procedimiento de Broyden para obtener los nuevos valores de T_n y V_n. Como hemos someramente comentado en el Capítulo IV, el método de Broyden es realmente una técnica de Newton-Raphson modificada para mejorar la performance en cuanto al tiempo de cómputo. En la Figura (X.4) se muestra un esquema lógico del procedimiento de cálculo. Sin embargo, el método de Tomich muestra dificultades para mezclas no ideales en las cuales los valores de K_{in} son función de la composición. En ese caso las Ecuaciones (7) que conforman la matriz tridiagonal forman un conjunto sumamente no lineal y la convergencia resulta dificultosa o bien imposible. Para ello debe implementarse un nuevo lazo externo de composiciones, al igual que lo explicado para el equipo flash en la Sección (IX.3), o bien implementar métodos globales simultáneos. Si se utiliza la primera opción, se comprobará que en general el algoritmo es muy inestable para problemas con mezclas altamente no ideales. Esto es debido a que el sistema de ecuaciones es altamente no lineal y por lo tanto no puede descomponerse adecuadamente en una secuencia de resolución o partición como la expresada, principalmente porque las propiedades fisicoquímicas, en particular las constantes de equilibrio son muy dependientes de las composiciones, las cuales a su vez conforman el lazo externo de iteración. Dado que aquí tenemos muchas variables (el problema es equivalente a una sucesión de equipos de evaporación flash en serie) el grado de dificultad para la convergencia (inestabilidad del método) crece consecuentemente. Es por ello que necesariamente, si se pretende disponer de un algoritmo eficiente para resolver todos los casos que se presenten (por otra parte esto es un requisito indispensable para un simulador de propósitos generales), será necesario encarar un método de resolución global o simultáneo respecto de todas las

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

variables.

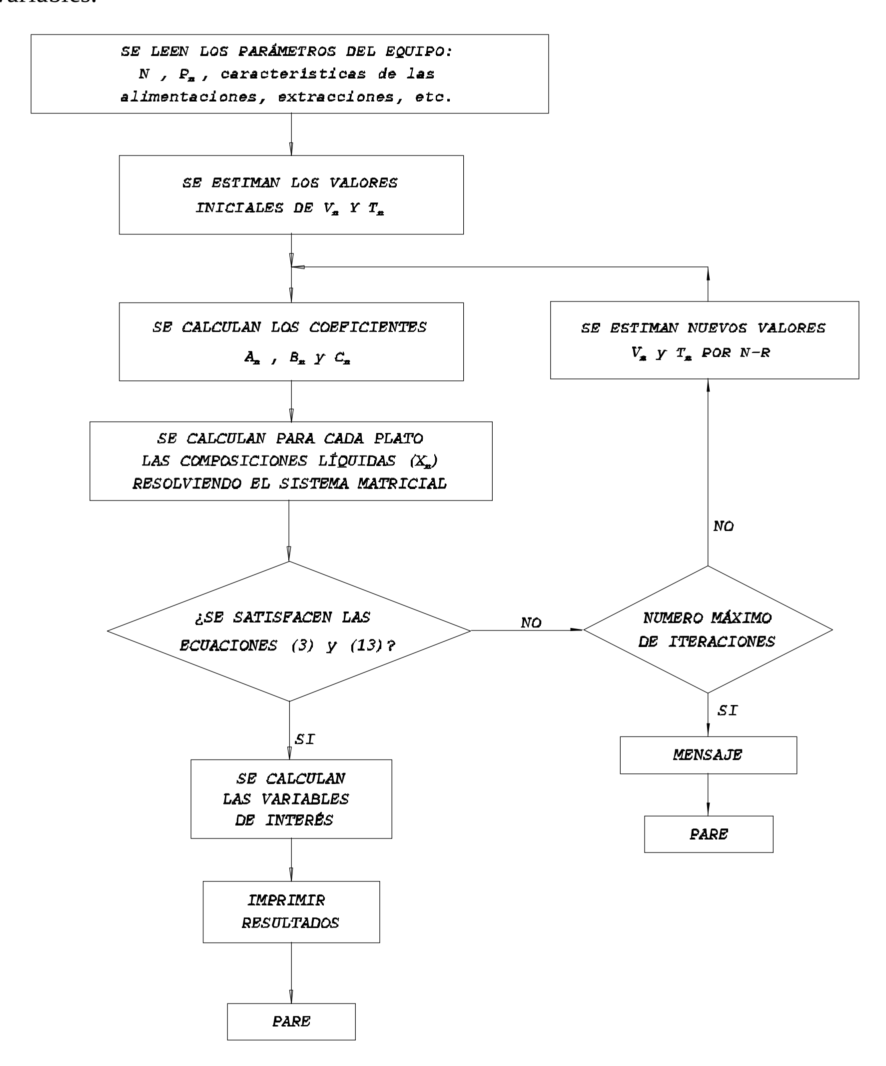


Figura: X.4: Cálculo de un sistema multicomponentes-multietapas por el método semi-riguroso de corrección simultánea (válido para sistemas ideales).

Para este propósito, podemos utilizar los métodos numéricos que analizamos en el Capítulo IV, especialmente aquellos que aprovechan la forma particular de la matriz de coeficientes, según ya vimos en el método de Tomich. El problema es que ahora debemos contemplar todas las variables simultáneamente, y como veremos en el próximo punto, ello nos lleva a la necesidad de resolver matrices tridiagonales en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

bloque. En síntesis, para el caso de columnas de destilación que procesan mezclas no ideales, la opción más aceptable es recurrir a una estrategia global. Como vimos en el Capítulo IV, los sistemas de ecuaciones con una matriz de coeficientes tridiagonal en bloque son fáciles de resolver.

X.5 MÉTODOS RIGUROSOS DE RESOLUCIÓN SIMULTÁNEA

Los métodos semi-rigurosos o simplificados convergen con dificultad o bien no convergen para separaciones que involucran mezclas altamente no ideales o en casos donde el separador es absorbedor o *stripper* en una sección y fraccionador en la otra.

Los métodos matriciales más generales capaces de resolver cualquier tipo de separación multicomponente se basan en la solución de las ecuaciones MESEN (Masa, Equilibrio, Suma, Energía) mediante técnicas de corrección simultánea. Por ejemplo, mediante Newton-Raphson (N-R).

Para desarrollar un procedimiento de correcciones simultáneas por Newton-Raphson se debe elegir y ordenar las variables e incógnitas y las funciones correspondientes. Goldstein y Stanfield (1970) demostraron que agrupar las ecuaciones por tipo es computacionalmente más eficiente para problemas que implican un gran número de componentes pero pocas etapas. Alternativamente es más eficiente agrupar las funciones de acuerdo a las etapas para problemas que implican un número elevado de las mismas pero relativamente pocos componentes. Este es el método descripto por Naphtali y Sandholm (1971), que será analizado a continuación. Para utilizar una nomenclatura similar a la propuesta por los autores, se adoptarán los símbolos según el modelo de etapas de equilibrio indicado en la Figura (X.5).

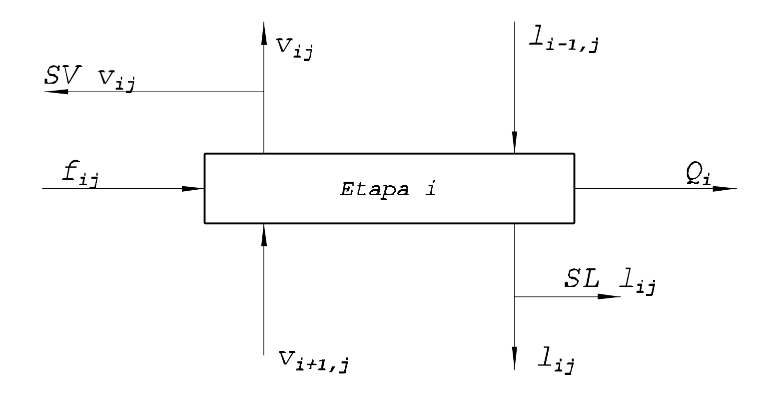


Figura X.5: Representación esquemática de una etapa de equilibrio.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Aquí *asignamos* el índice *i a las etapas y el índice j a los componentes*. La forma de interpretación es idéntica a lo explicado anteriormente.

X.5.1 Sistema de Ecuaciones

Se considera el caso de una columna de *N* platos que separe *NC* componentes en donde *1* es el plato tope y *N* el plato del fondo. Se asume la existencia de extracciones de corrientes laterales de líquido ,*SL* y vapor, *SV*. L_i y V_i representan los flujos molares totales de líquido y vapor del plato *i*. Se considera a la temperatura T_i, y los caudales molares de vapor y líquido para cada etapa para cada componente (v_{ij} y l_{ij}) como variables independientes. Como ya hemos visto, el primer paso para obtener el modelo, esto es, el sistema de ecuaciones, es adoptar un conjunto de hipótesis que describan los procesos físicos asociados al equipo.

Hipótesis adoptadas:

- No se toman en cuenta los parámetros geométricos del plato (dimensiones) y sus relaciones con las variables intensivas.
- No se toma en cuenta las relaciones correspondientes a la caída de presión en cada plato. Es decir, ΔP_i es constante y provisto por el usuario, y no se calcula en función de los parámetros geométricos y las variables independientes (en el Capítulo XV se verá como relajar esta hipótesis y la anterior).
- La eficiencia de Murphree se considera constante. Esto significa que no se contempla su funcionalidad con los parámetros geométricos del plato y las variables independientes.
- No se considera el intercambio calórico respecto del ambiente por conducción y/o convección.
- No se calcula el efecto de mezcla en los platos. Esta información se *introduce* mediante el valor de la eficiencia dado por el usuario.
- No se contemplan dimensiones, ni factores de capacidad (área, coeficiente de intercambio, etc.) en el hervidor ni condensador. Tampoco se consideran niveles ni gradientes de presiones como fuerza impulsora para el flujo de líquidos y/o vapores extraídos o introducidos a la columna. Se supone que existen los dispositivos adecuados (o el área suficiente) para lograr las transferencias calculadas a través de los balances y las relaciones de equilibrio.
- No se consideran reacciones químicas.
- La estructura adoptada supone un absorbedor/desorbedor o bien la existencia de condensadores y/o rehervidores parciales (valen las relaciones de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

equilibrio). Para otras estructuras deben agregarse algunas ecuaciones como se verá más adelante en este capítulo.

- Los valores de extracciones laterales, tanto para corrientes gaseosas o líquidas,(SV y SL), se expresan como un porcentaje del caudal correspondiente a la corriente de dicha etapa y no como un valor absoluto.
- Se considera una sola fase líquida. Si hubiera coexistencia de dos fases líquidas y una vapor debe modificarse el modelo para contemplar dicha situación.
- La información del *holdup* líquido y vapor en función del conjunto de hipótesis adoptadas es irrelevante (en el Capítulo XV se verá como relajar esta hipótesis).

A continuación, a partir de este conjunto de suposiciones, podemos plantear los siguientes balances:

Balance de energía para cada etapa (i = 1, 2, ..., N):

$$EN_i = -(1 + SV_i)\, HV_i \sum_{j=1}^{NC} v_{ij} - (1 + SL_i)\, HL_i \sum_{j=1}^{NC} l_{ij} +$$

$$+ HV_{i+1} \sum_{j=1}^{NC} v_{i+1,j} + HL_{i-1,j} \sum_{j=1}^{NC} 1_{i-1,j} + HF_i \sum_{j=1}^{NC} f_{ij} + Q_i = 0 \quad (17)$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots , N \ ;\ j = 1, 2, \ldots , NC$$

Balances de materia por componente (j) para cada etapa (i):

$$M_{ij} = -(1 + SV_i)\, v_{ij} - (1 + SL_i)\, 1_{i,j} + v_{i+1,j} + 1_{i-1,j} + f_{ij} = 0 \quad (18)$$

Relaciones de equilibrio para el componente(j) en cada etapa (i):

Partiendo de la clásica relación de eficiencia de etapa propuesta por Murphree:

$$\eta_{ij} = \frac{y_{i+1,j} - y_{ij}}{y_{i+1,j} - y^*_{ij}} \quad (19)$$

donde el supraíndice (*) indica composición de equilibrio.

Mediante las siguientes manipulaciones algebraicas e introduciendo las variables independientes del problema (v_{ij} y l_{ij}) tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\eta_{ij}\ (y_{i+1,j} - y_{ij}^{*}) = y_{i+1,j} - y_{i,j}$$

Utilizando la relación de equilibrio:

$$\eta_{ij}\ y_{i+1,j} - \eta_{j}\ K_{ij}\ x_{ij} = y_{i+1,j} - y_{ij}$$

Además, por definición:

$$y_{ij} = \frac{v_{ij}}{V_i}$$

Obtenemos la siguiente ecuación:

$$E_{ij} = \eta_{ij}\ \frac{v_{i+1,j}}{V_{i+1}} - \eta_{ij}\ K_{ij}\ \frac{l_{ij}}{L_i} - \frac{v_{i+1,j}}{V_{i+1}} + \frac{v_{ij}}{V_i} = 0$$

Tomando factor común y multiplicando ambos miembros por V_i obtenemos:

$$E_{ij} = \eta_{ij}\ K_{ij}\ \frac{l_{ij}}{L_i}\ V_i - v_{ij} + \frac{V_i}{V_{i+1}}\ v_{i+1}\ (1 - \eta_{ij}) = 0$$

de donde reordenado:

$$E_{ij} = \frac{\eta_{ij}\ K_{ij}\ V_i\ l_{ij}}{L_i} - v_{ij} + \frac{(1 - \eta_{i,j})\ v_{i+1,j}\ V_i}{V_{i+1}} = 0 \qquad (20)$$

Se tienen por lo tanto *(2 x NC + 1)* ecuaciones y variables en cada plato y un total de *N x (2 x NC + 1)* en la columna completa de *N* etapas, una vez que especifican las condiciones de alimentación y todos los caudales de extracción (SL_i y SV_i) y las presiones por etapa, P_i.

En el método propuesto por Napthali y Sandholm, las ecuaciones se resuelven simultáneamente en forma iterativa por el método de Newton-Raphson, generándose una serie de valores para las variables de iteración, hasta que las funciones de discrepancia de materia (*M*), equilibrio (*E*) y energía (*EN*) son llevadas a cero dentro de un margen de tolerancia, si la serie resulta convergente.

Las Ecuaciones (17), (18) y (20) son funciones de discrepancia, esto es, son

una medida cuantitativa de los errores en los balances y relaciones de equilibrio en función de los valores presentes de 1_{ij}, v_{ij} y T_i. En otras palabras, EN_i es el número de unidades de energía/tiempo por el cual el balance de energía no se satisface, mientras que M_{ij} y F_{ij} representan las discrepancias en los balances de materia (unidades de flujo) y para las relaciones de equilibrio, respectivamente. Debe notarse que los balances de materia y energía no son relativos sino que toman el valor absoluto de las discrepancias.

Conviene normalizar dividiendo al balance de materia por la suma de los caudales de alimentación y al de energía por la suma de los contenidos entálpicos de las alimentaciones (constantes) a los efectos de uniformar los valores de las discrepancias (al igual que en el modelado del equipo flash visto en el capítulo anterior, ya que de esta manera se facilita el tratamiento numérico).

Sean $\boldsymbol{X}$ y $\boldsymbol{F}$ los siguientes vectores:

$$\underline{X} = \left[X_1,\ X_2,\ \ldots\ ,\ X_i,\ \ldots\ ,\ X_N \right] \tag{21}$$

$$\underline{F} = \left[F_1,\ F_2,\ \ldots\ ,\ F_i,\ \ldots\ ,\ F_N \right] \tag{22}$$

Sea $\boldsymbol{X_i}$ el vector de variables independientes correspondientes al plato i ordenado de la siguiente manera:

$$X_i = \left[v_{i,1},\ v_{i,2},\ \ldots\ ,\ v_{i,NC},\ T_i,\ 1_{i,1},\ 1_{i,2},\ \ldots\ ,1_{i,NC} \right] \tag{23}$$

Esto es, en primer lugar las NC variables pertenecientes a los caudales molares de vapor de cada componente en la etapa i, luego la temperatura de la etapa i y por último los NC caudales molares de líquido pertenecientes a la etapa. Por lo tanto, es un vector de dimensión ($2 \times NC + 1$); mientras que la dimensión total de $\boldsymbol{X}$ es $N \times (2 \times NC+1)$.

Por otra parte, $\boldsymbol{F_i}$ es el vector de funciones discrepancia asociadas al plato i ordenado de la siguiente manera:

$$F_i = \left[EN_i,\ M_{i,1},\ M_{i,2},\ \ldots\ ,\ M_{i,NC},\ E_{i,1},\ E_{i.2},\ \ldots\ ,\ E_{i,NC} \right]$$

Esto es, primero al balance de energía y luego las ecuaciones correspondientes a los balances de materia y relaciones de equilibrio, respectivamente. Luego, la dimensión de $\boldsymbol{F}$ es también $N \times (2 \times NC + 1)$.

Usando esta notación, el método de Newton-Raphson impone que se genere a partir de una estimación inicial $\boldsymbol{X}^{(0)}$ una serie de valores para el vector de variables

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

independientes $\boldsymbol{X^{(k)}}$ según la siguiente expresión:

$$\Delta X^{(k)} = - \left[\left(\frac{dF}{dX} \right)^{-1} \right]^{(k)} F^{(k)} \qquad (24)$$

Los incrementos se usan para calcular el próximo conjunto de variables independientes, que se determinan de acuerdo a la siguiente expresión:

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} + \Delta X^{(k)} \qquad (25)$$

[*dF / dX*] representa la matriz Jacobiana que contiene las derivadas parciales de todas las funciones con respecto a todas las variables. El exponente negativo simboliza la operación de invertir la matriz Jacobiana. Por último, una vez invertida, la matriz debe ser multiplicada por el vector ***F*** para obtener como resultado otro vector ***ΔX***. De igual manera, la suma indicada en la Ecuación (25) es una suma de vectores, la cual se realiza componente a componente. A cada variable del vector ***X***, se le suma el incremento obtenido ***ΔX***, en cada iteración, según lo visto en el Capítulo IV. Estructuralmente, la matriz Jacobiana se compone de valores que representan las derivadas de las funciones masa, energía y equilibrio, para cada etapa y componente, respecto a todas las variables independientes (v_{ij} ,T_i y l_{ij}); esto es, composiciones, caudales molares de líquidos y vapores de cada componente y la temperatura en cada etapa. Esquemáticamente, podemos simbolizar la matriz Jacobiana ***J* = [*dF / dX*]** de la siguiente forma:

$$\begin{bmatrix} \frac{dF_1}{dX_1} & \frac{dF_1}{dX_2} & .... & \frac{dF_1}{dX_N} \\ \frac{dF_2}{dX_1} & \frac{dF_2}{dX_2} & .... & \frac{dF_2}{dX_N} \\ . & . & .... & . \\ . & . & .... & . \\ . & . & .... & . \\ \frac{dF_N}{dX_1} & \frac{dF_N}{dX_2} & .... & \frac{dF_N}{dX_N} \end{bmatrix} \qquad (26)$$

Cada elemento **[$\boldsymbol{dF_i}$ / $\boldsymbol{dX_j}$]** de la matriz anterior es una submatriz de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

dimensión (*2 x NC+1*) esto es, las variables independientes pertenecientes a cada etapa. En efecto, cada submatriz en forma genérica **[*dF*$_i$ */ dX*$_j$]** resulta:

$$\begin{bmatrix} \frac{dF_{i,1}}{dX_{j,1}} & \frac{dF_{i,1}}{dX_{j,2}} & .... & \frac{dF_{i,1}}{dX_{j,2NC+1}} \\ \frac{dF_{i,2}}{dX_{j,1}} & . & .... & \frac{dF_{i,2}}{dX_{j,2NC+1}} \\ . & . & .... & . \\ . & . & .... & . \\ . & . & .... & . \\ \frac{dF_{i,2NC+1}}{dX_{j,1}} & . & .... & \frac{dF_{i,2NC+1}}{dX_{j,2NC+1}} \end{bmatrix} \qquad (27)$$

Esto es, submatrices cuadradas de orden (*2 x NC + 1*); que agrupan las funciones y variables pertenecientes a cada etapa de la cascada.

Debe notarse que las funciones de cada plato *i* involucran sólo variables de los platos (*i-1*), *i* e (*i+1)*. Luego, las derivadas parciales de las funciones del plato con respecto a otras variables distintas a las mismas son nulas. Consecuentemente, la matriz Jacobiana adopta la estructura tridiagonal en bloques indicada en la Figura (X: 6). Esto se debe a que al no estar conectadas las etapas entre sí, salvo en la forma indicada, no existe intercambio de información entre las mismas, haciendo que las dependencias funcionales sean solamente las indicadas. Si en cambio existieran reciclos entre etapas, entonces la matriz no será tridiagonal en bloques, cambiando su forma en función del esquema (topología) adoptada por el equipo a simular.

Además, debe remarcarse aquí que la forma que adopta la matriz de coeficientes es dependiente no solo de la topología del equipo, sino de la forma en que se ordenan las funciones y variables. Se deja al lector como ejercicio el intercambiar las funciones en el vector ***F*** y las variables en el vector ***X***, a los efectos de observar lo que sucede con la matriz Jacobiana.

En efecto, ya se ha mencionado anteriormente que si se agrupan las ecuaciones por tipo (por ejemplo todas las de masa, energía y equilibrio) en vez de ordenarlas , según vimos más arriba (por etapa), la matriz Jacobiana resulta diferente. Por lo tanto, deberá optarse por estrategias de ordenamiento que permitan encontrar estructuras que luego puedan resolverse fácilmente, por ejemplo usando el algoritmo de Thomas para una matriz tridiagonal en bloques.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\begin{bmatrix} [B_1] & [C_1] & [0] & \cdot\ \cdot & [0] & [0] \\ [A_2] & [B_2] & [C_2] & \cdot\ \cdot & [0] & [0] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\ \vdots & \vdots & \vdots \\ [0] & [0] & [0] & \cdot\ \cdot & [A_N] & [B_N] \end{bmatrix}$$

Figura. X.6: Esquema de la matriz tridiagonal en bloques. Cada submatriz es de orden (2 x NC + 1) N. Nótese que a diferencia de las submatrices [dF_i / dX_j] indicadas como [A], [B] o [C], las demás submatrices son nulas. Por ello se la llama matriz *tridiagonal en bloques*.

Cada bloque o submatriz $\boldsymbol{A_i}$, $\boldsymbol{B_i}$ o $\boldsymbol{C_i}$ representa una submatriz de orden (2 x NC + 1) correspondiente a las derivadas parciales de las funciones del plato *i* con respecto a las variables de los platos (*i-1*), *i* o (*i+1*), respectivamente. En otras palabras, el Sistema (26) contiene submatrices en su mayoría nulas. Las submatrices no nulas en la diagonal y bandas adyacentes se obtienen según (27).

Consecuentemente, para resolver el Sistema de Ecuaciones (24) debemos invertir una matriz de dimensión [*N x* (*2 x NC + 1*)], pero ordenada de tal forma que resulta poco densa y tridiagonal en bloques. Esto hace que el método numérico de resolución pueda ser planteado en una manera mucho más eficiente, según lo indicado en el Capítulo IV. En efecto, el sistema de ecuaciones puede tratarse mediante una adaptación sencilla del método propuesto por Tomich para matrices tridiagonales simples, esto es, mediante una adaptación del método de eliminación Gaussiana.

La ventaja de este procedimiento no sólo se nota en la rapidez y sencillez del cálculo, sino también en el consumo de memoria, el tiempo y los errores por truncamiento y redondeo. Así, si se utiliza un método convencional para resolver el sistema (Gauss, etc.) se deberá computar la matriz Jacobiana en su totalidad y retenerla (por lo tanto debe disponerse de memoria suficiente). En cambio, según ya hemos visto, cuando se usa el algoritmo de Thomas para este caso, sólo es necesario calcular las submatrices paso a paso, y luego, siguiendo la secuencia de cálculo especificada, se logran los sub-vectores integrantes del vector solución. De esta

manera, el espacio de memoria requerido es muchísimo menor que en la estrategia alternativa. Esto es muy importante, especialmente cuando en un *flowsheet* existen varias columnas de destilación. En este caso, el ahorro es sustancial.

La Figura (X.7) indica simplificadamente la secuencia de pasos a seguir para la resolución del sistema de ecuaciones anterior.

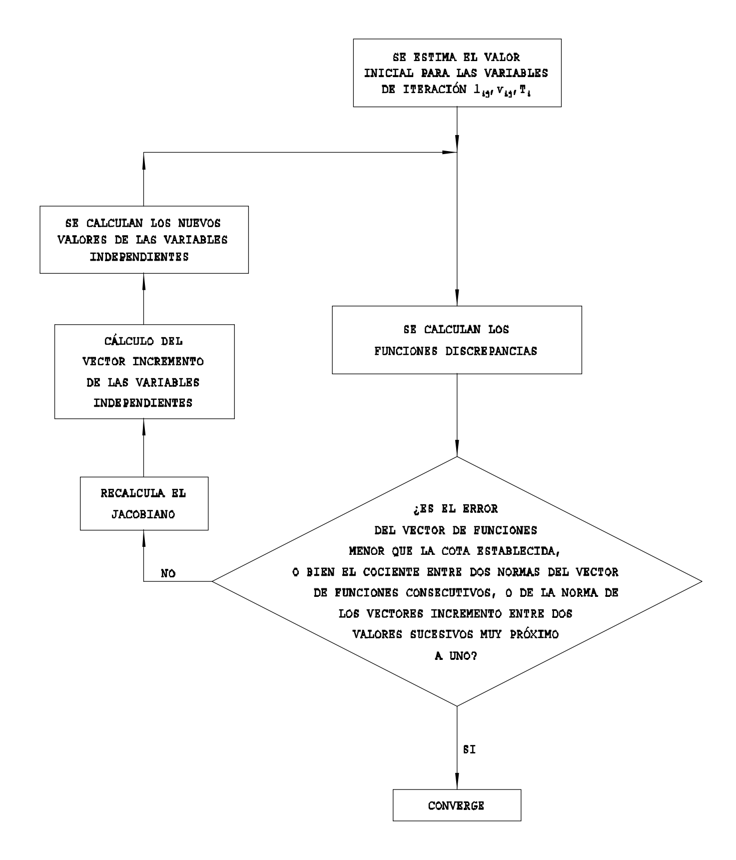


Figura X.7: Esquema simplificado de iteraciones para la resolución del sistema de ecuaciones.

A continuación se considerará la estructura y construcción de las distintas submatrices que conforman el Jacobiano (de forma tridiagonal en bloques), a los efectos de ejemplificar cómo se procede a determinar iteración a iteración los valores de la misma.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

X.5.2 Estructura del Jacobiano

Como ya hemos visto, existen tres bloques diferenciados o submatrices características en la matriz Jacobiana. A continuación se analizarán las derivadas correspondientes a cada una de ellas.

Submatrices tipo A

Contienen las derivadas parciales de las funciones discrepancia de la etapa *i* con respecto a las variables de la etapa (*i-1*).

Derivadas del balance de energía ($EN_{i,1} = F_{i,1}$), primer posición en los sub-vectores (pertenecientes a cada etapa) del vector de funciones discrepancias:

$$\frac{dF_{i,1}}{dv_{i-1,j}} = \frac{dF_{i,1}}{dX_{i-1,j}} = 0 \qquad (28)$$

$$con \;\; i = 1, 2, \ldots, N \;;\; j = 1, 2, \ldots, NC$$

Esto se debe a que el caudal de vapor del plato anterior no ingresa a la etapa *i*, y por lo tanto no aparece como variable independiente en el balance (Ecuación (17)); esto es, su derivada es nula.

$$\frac{dF_{i,1}}{dT_{i-1}} = \frac{dF_{i,1}}{dX_{i-1,NC+1}} = - \frac{d\left(Hl_{i-1} \sum_{j=1}^{NC} 1_{i-1,j} \right)}{dT_{i-1}} \qquad (29)$$

$$con \;\; i = 1, 2, \ldots, N$$

Esta expresión indica que en la Ecuación (17) sólo la entalpía del plato anterior es afectada por una variación en la tempertura T_{i-1}, incidiendo en el cálculo de la derivada. Por último, para la derivada del balance de energía respecto a los caudales líquidos del plato anterior se tiene:

$$\frac{dF_{i,1}}{d1_{i-1,j}} = \frac{dF_{i,1}}{dX_{i-1,NC+1+j}} = - \frac{d\left(Hl_{i-1} \sum_{j=1}^{NC} 1_{i-1,j} \right)}{d1_{i-1,j}} \qquad (30)$$

$$con \;\; i = 1, 2, \ldots, N \;;\; j = 1, 2, \ldots, NC$$

Nuevamente, sólo la entalpía del plato anterior aparece en la expresión. En todo lo que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

sigue omitiremos la notación global $\boldsymbol{X_i}$, recordando que $\boldsymbol{X_i} = [v_{ij}, T_i, 1_{ij}]$ con $i = 1, ..., N$ y $j = 1, ..., NC$.

Derivada del balance de materia ($F_{i,j+1}$ con $i = 1, 2, ..., N$; $j = 1, 2, ..., NC$): ya que el balance no depende de las variaciones del caudal de vapor del plato anterior (no ingresa a la etapa *i*).

$$\frac{dF_{i,j+1}}{dv_{i-1,k}} = 0 \tag{31}$$

$$con \; i = 1,\, 2,\, ...\, ,\, N \; ; \; j = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC \; ; \; k = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC$$

$$\frac{dF_{i,j+1}}{dT_{i-1}} = 0 \tag{32}$$

$$con \; i = 1,\, 2,\, ...\, ,\, N \; ; \; j = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC$$

ya que la temperatura no aparece como variable independiente en la Ecuación (18).

$$\frac{dF_{i,j+1}}{d1_{i-1,k}} = \delta_{jk} \tag{33}$$

$$con \; i = 1,\, 2,\, ...\, ,\, N \; ; \; j = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC \; ; \; k = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC$$

donde $\delta_{jk} = 1$ si $j = k$, o bien *0* si *j es distinto de k*. Aquí las derivadas no nulas se deben a que en la Ecuación (17) aparecen las variables ($l_{i-1,k}$).

Derivadas de las relaciones de equilibrio ($F_{i,NC+1+j}$ con $i = 1, ..., N$; $j = 1, ..., NC$):

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dv_{i-1,k}} = \frac{dF_{i,NC+1+j}}{dT_{i-1}} = \frac{dF_{i,NC+1+j}}{d1_{i-1,k}} = 0 \tag{34}$$

$$con \; i = 1,\, 2,\, ...\, ,\, N \; ; \; j = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC \; ; \; k = 1,\, 2,\, ...\, ,\, NC$$

Submatrices tipo B

Estas matrices contienen las derivadas parciales de las funciones del plato *i* con respecto a las variables del mismo plato *i*.

Derivada del balance de energía: ($F_{i,1}$ con $i = 1, ..., N$):

$$\frac{dF_{i,1}}{dT_i} = -\,(1 + SV_i)\,\frac{d\left(HV_i \sum_{j=1}^{NC} v_{i,j}\right)}{dT_i} - (1 + SL_i)\,\frac{d\left(HL_i \sum_{j=1}^{NC} 1_{i,j}\right)}{dT_i} \qquad (35)$$

$$\frac{dF_{i,1}}{d1_{i,j}} = -\,(1 + SL_i)\,\frac{d\left(HL_i \sum_{j=1}^{NC} 1_{i,j}\right)}{d1_{i,j}} \qquad (36)$$

Derivada del balance de materia:($F_{i,j+1}$ con i = 1, ..., N ; j = 1, ..., NC):

$$\frac{dF_{i,j+1}}{dv_{i,k}} = -\,(1 + SV_i)\;\delta_{j,k} \qquad (37)$$

$$con\;\; i = 1,\,2,\,\dots\,,\,N\;;\; j = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC\;;\; k = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC$$

$$\frac{dF_{i,j+1}}{dT_i} = 0 \qquad (38)$$

$$con\;\; i = 1,\,2,\,\dots\,,\,N\;;\; j = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC$$

$$\frac{dF_{i,j+1}}{d1_{i,k}} = -\,(1 + SL_i)\;\delta_{j,k} \qquad (39)$$

$$con\;\; i = 1,\,2,\,\dots\,,\,N\;;\; j = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC\;;\; k = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC$$

Derivada de las relaciones de equilibrio($F_{i,NC+1,j}$ con i = 1, ..., N ; j = 1, ..., NC):

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{d1_{i,k}} = \frac{\eta_{ij}\;V_i}{L_i}\left[K_{i,j}\;\delta_{j,k} + 1_{i,j}\left(\frac{dK_{i,j}}{d1_{i,k}}\right) - \frac{1_{i,j}}{L_i}\;K_{i,j}\right] \qquad (40)$$

$$con\;\; i = 1,\,2,\,\dots\,,\,N\;;\; j = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC\;;\; k = 1,\,2,\,\dots\,,\,NC$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dv_{i,k}} = \frac{\eta_{ij}\ l_{i,j}}{L_i}\left[K_{i,j} + V_i\left(\frac{dK_{i,j}}{dv_{i,k}}\right)\right] - \delta_{j,k} + (1 - \eta_{ij})\ \frac{v_{i+1,j}}{V_{i+1}} \qquad (41)$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots, N\ ;\ j = 1, 2, \ldots, NC\ ;\ k = 1, 2, \ldots, NC$$

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dT_i} = \frac{\eta_{ij}\ 1_{i,j}\ V_i}{L_i}\left(\frac{dK_{i,j}}{dT_i}\right) \qquad (42)$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots, N\ ;\ j = 1, 2, \ldots, NC\ ;\ k = 1, 2, \ldots, NC$$

en donde :

$$\frac{dK_{i,j}}{d1_{i,k}} = \sum_{p=1}^{NC}\left(\frac{dK_{i,j}}{dx_{i,p}}\right)\left(\frac{dx_{i,p}}{d1_{i,k}}\right)$$

$$\frac{dK_{i,j}}{dv_{i,k}} = \sum_{p=1}^{NC}\left(\frac{dK_{i,j}}{dy_{i,p}}\right)\left(\frac{dy_{i,p}}{dv_{i,k}}\right)$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots, N\ ;\ j = 1, 2, \ldots, NC\ ;\ k = 1, 2, \ldots, NC$$

Submatrices tipo C

Contienen las derivadas de las funciones de la etapa *i* respecto a las variables de la etapa (*i+1*).

Derivadas del balance de energía: ($F_{i,1}$ con i = 1, ...,N):

$$\frac{dF_{i,1}}{dv_{i+1,j}} = \frac{d\left(HV_{i+1}\sum_{j=1}^{NC} v_{i+1,j}\right)}{dv_{i+1,j}} \qquad (43)$$

$$\frac{dF_{i,1}}{dT_{i+1}} = \frac{d\left(HV_{i+1}\sum_{j=1}^{NC} v_{i+1,j}\right)}{dT_{i+1}} \qquad (44)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dF_{i,1}}{d1_{i+1,j}} = 0 \qquad (45)$$

Derivadas del balance de materia ($F_{i,j+1}$ con $i = 1, ..., N$; $j = 1, ...,NC$):

Estas derivadas se calculan fácilmente al igual que lo indicado en los casos anteriores. La derivada con respecto a la temperatura y caudales líquidos es nula. En cambio, para los caudales de vapor existen derivadas con valores unitarios según las siguientes expresiones:

$$\frac{dF_{i,\ j+1}}{d1_{i+1,\ k}} = 0 \qquad (46)$$

$$con\ \ i = 1,\ 2,\ ...\ ,\ N\ ;\ j = 1,\ 2,\ ...\ ,\ NC\ ;\ k = 1,\ 2,\ ...\ ,\ NC$$

$$\frac{dF_{i,\ j+1}}{dT_{i+1}} = 0 \qquad (47)$$

$$con\ \ i = 1,\ 2,\ ...\ ,\ N\ ;\ j = 1,\ 2,\ ...\ ,\ NC$$

$$\frac{dF_{i,\ j+1}}{dv_{i+1,\ k}} = \delta_{jk} \qquad (48)$$

$$con\ \ i = 1,\ 2,\ ...\ ,\ N\ ;\ j = 1,\ 2,\ ...\ ,\ NC$$

Derivada de las relaciones de equilibrio: ($F_{i,j+1+NC}$ *con* $i = 1, ..., N$; $j = 1, ...,NC$):

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dT_{i+1}} = 0 \qquad (49)$$

$$con\ \ i = 1,\ 2,\ ...\ ,\ N\ ;\ j = 1,\ 2,\ ...\ ,\ NC$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dv_{i+1,k}} = \frac{\left(1 - \eta_{ij}\right) V_i}{V_{i+1}} \left(\delta_{j,k} - \frac{V_{i+1,j}}{V_{i+1}} \right) \tag{50}$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots , N \ ; \ j = 1, 2, \ldots , NC \ ; \ k = 1, 2, \ldots , NC$$

$$\frac{dF_{i,NC+1+j}}{dl_{i+1,k}} = 0 \tag{51}$$

$$con\ i = 1, 2, \ldots , N \ ; \ j = 1, 2, \ldots , NC \ ; \ k = 1, 2, \ldots , NC$$

X.5.3 Procedimiento Numérico de Resolución

Como se ha explicitado en los Capítulos V y VI, todo módulo de equipo debe ser programado de forma tal de interactuar con el sistema de administración o lógica central del simulador en el cual estará inserto.

En el esquema simplificado adjunto (ver Figura (X.8)) se indican el bloque de entrada/salida de datos y la conexión con el sistema de programas de estimación de propiedades fisicoquímicas y el banco de datos general del simulador.

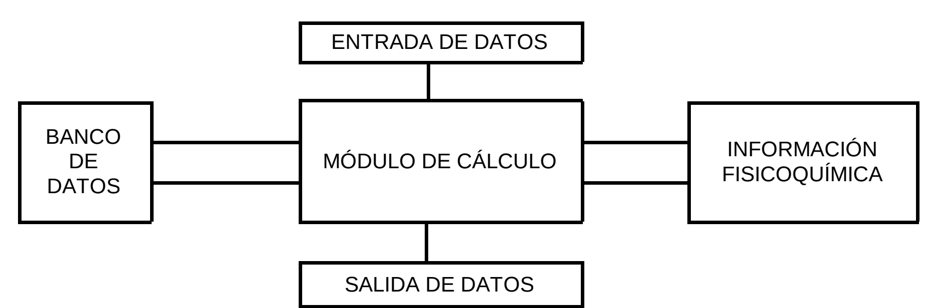


Figura X.8: Esquema general de funcionamiento.

Para este módulo, los parámetros de equipo a ser introducidos por el usuario son el número de platos, el número de componentes, las presiones en cada etapa, el número y especificación de las alimentaciones y extracciones laterales, la ubicación de las corrientes de entrada/salida del equipo y el tipo de inicialización adoptado para comenzar el proceso iterativo. Esto es, toda la información necesaria para que el sistema de ecuaciones planteado resulte compatible, o sea que exista igual número de ecuaciones que de incógnitas.

Debe destacarse, no obstante, que en nuestro planteo sólo contemplamos una

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

cascada de etapas teóricas (o reales, a través de la eficiencia de Murphree) en contracorriente. De esta forma, no existen por el momento ni el condensador ni el rehervidor, clásicos en las columnas de destilación.

Es por ello que no especificamos ninguna de las variables asociadas a los mismos, como ser el reflujo, la energía intercambiada en el hervidor o en el condensador, etc.

Sea cual fuere el equipo a simular, la estimación del punto inicial para generar la secuencia iterativa es de suma importancia, ya que una mala inicialización puede provocar un gran tiempo extra de cómputo o, eventualmente, la falta de convergencia.

En la Figura (X.9) se muestra un diagrama lógico en el cual se mencionan los pasos a seguir para ejecutar el cálculo del módulo de equipo:

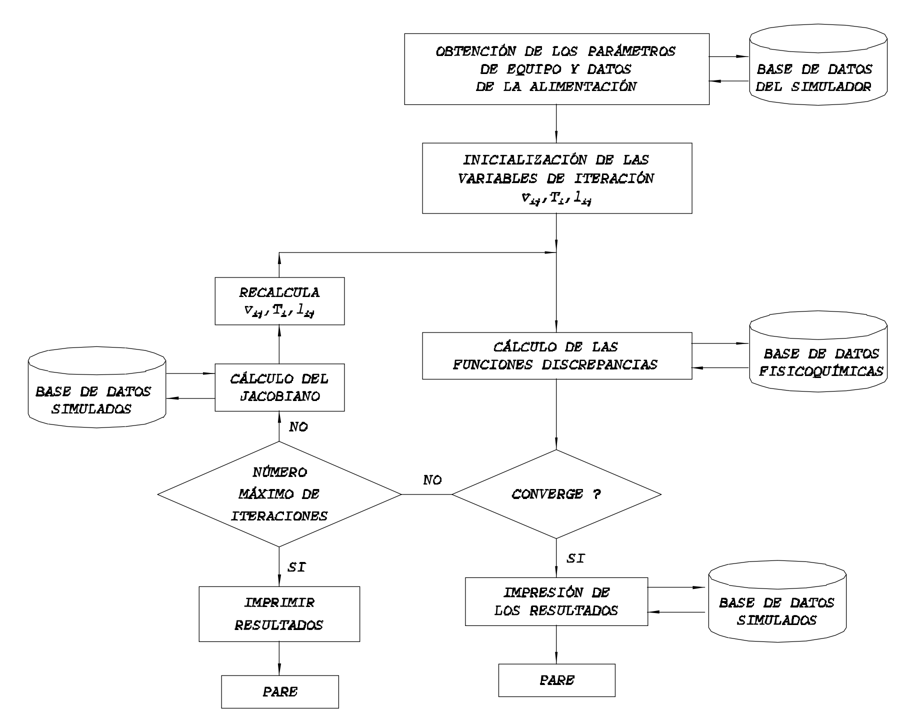


Figura X.9: Pasos a ejecutar para el cálculo del módulo.

Criterios de inicialización

Debido a que el algoritmo desarrollado se basa en el método de Newton-Raphson es evidente que el punto de arranque (inicialización) es fundamental para la convergencia. Este problema es crítico en sistemas altamente no ideales; tales como las mezclas azeotrópicas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En general debe lograrse un perfil de variables los más próximo posible a la solución. Si bien es imposible lograr un criterio que contemple a todas las situaciones posibles, se pueden implementar metodologías que cubran la mayoría de los casos. No obstante, debe anticiparse que no existe un método de inicialización que sea óptimo para todos los problemas.

Dado que las variables independientes del sistema son temperatura y caudales molares de vapor y líquidos, son éstas las que deben inicializarse de forma tal de lograr una aproximación suficientemente buena al perfil solución.

Debido a que pueden darse alimentaciones múltiples (también multifásicas) o bien extracciones (gaseosas o líquidas) en platos intermedios; éstas se deben tener en cuenta en el perfil de caudales propuestos. Para ello, sobre la base de los caudales líquidos y gaseosos que ingresan por tope y fondo respectivamente, se van considerando las distintas corrientes intermedias (alimentaciones o extracciones) según el plato y la fase. De esta manera se dispone de perfiles escalonados de caudales totales de vapores y líquidos según la topología del sistema. Sin embargo, las variables a inicializar son los caudales molares de cada componente, por lo tanto debe transformarse el perfil de caudales totales a este requerimiento.

Para ello deben disponerse las composiciones de cada fase, en cada etapa. Existen en general varias alternativas para la inicialización; por ejemplo: lineal, constante, ideal, específica, etc.

En la inicialización a *perfil constante* se igualan las composiciones asumidas o especificadas, ya sean de tope y fondo, en todos los platos, para cada componente; tanto para líquidos como para vapores.

Otra alternativa consiste en tomar como composiciones del tope y fondo, tanto para líquidos como para vapores, a los valores estimados y/o especificados, para establecer un *perfil lineal* en función del número de platos entre los valores extremos para cada componente en cada fase.

La misma metodología (lineal o *constante*) se adopta para las temperaturas de cada etapa.

Otra estrategia supone, a partir de un perfil de caudales totales y temperaturas obtenido según lo explicitado anteriormente; utilizar el método semi-riguroso de la matriz triadiagonal (Ecuaciones (7)) para calcular *el primer perfil de composiciones* (asumiendo comportamiento ideal, esto es, $K = f(T)$), no dependiendo de las composiciones de líquido y vapor; utilizando para ello las hipótesis de cálculo analizadas en la sección anterior. Aquí, dados el perfil inicial de temperaturas, obtenemos el de composiciones.

Es de destacar que no existe un método eficiente para todos los casos, y no puede asegurarse convergencia (o mayor eficiencia) aplicando una estrategia de inicialización en particular para todos los casos posibles de encontrar en la práctica. No obstante, una adecuada estrategia de inicialización es una de las características que distingue a un simulador frente a otro, ya que mostrará más eficiencia (en la obtención

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de la convergencia) en un número representativo de casos (test del algoritmo).

Cálculo de las funciones discrepancia

Para el cálculo de las funciones discrepancias que involucran estimación de propiedades fisicoquímicas debe, en primer lugar, procederse al cómputo de las mismas. Por ejemplo, entalpías de vapor, HV_i,y de líquidos, HL_i ,para cada plato y las constantes de equilibrio, $K_{i,j}$, para cada componente y cada plato, según puede verse esquemáticamente en la Figura (X.10).

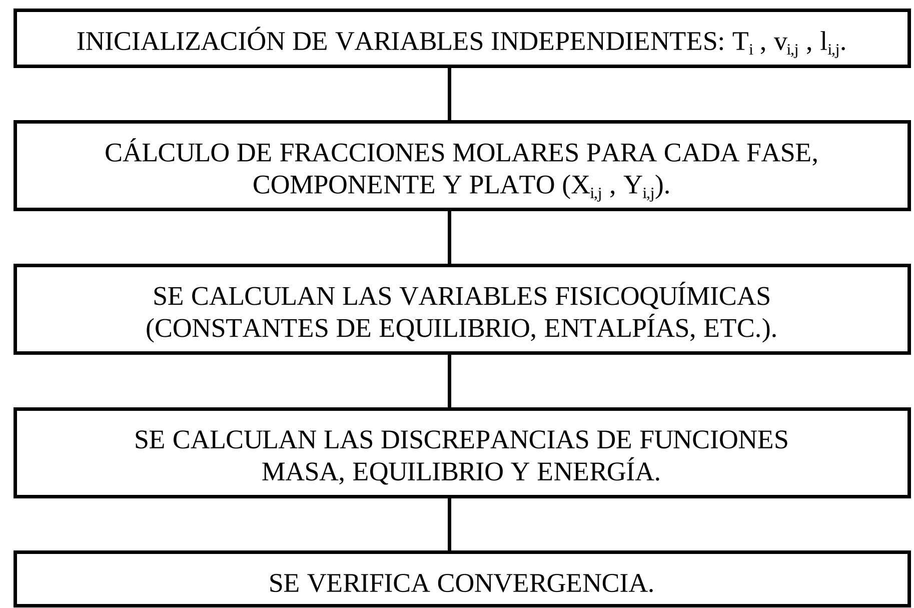


Figura X.10: Esquema de cálculo de las funciones discrepancia.

Debe recordarse que cada una de las anteriores propiedades fisicoquímicas exige un tedioso método de cálculo, especialmente cuando la mezcla a tratar es sumamente no ideal. Además, estos cómputos deben realizarse iteración a iteración, etapa a etapa. Es por ello que la minimización de las iteraciones para lograr convergencia es un punto vital.

Una vez calculadas las funciones discrepancia (error), se evalúa la sumatoria de los cuadrados de las mismas para verificar por comparación con la cota de error preestablecida, esto es, si se satisfacen todas las ecuaciones del sistema, que es equivalente a obtener la solución del problema.

Criterios de convergencia

Existe en la bibliografía (y en los manuales de cada simulador), reportes de

diversos criterios para la verificación de convergencia. Esto es, cuándo se considerará que la norma del vector discrepancia está próxima al valor nulo (por ejemplo, 10^{-3}). Por consiguiente, se debe implementar un criterio que presente la mayor generalidad posible compatible con un menor tiempo de ejecución.

El primer factor a tenerse en cuenta es si los valores calculados para las funciones discrepancia son valores absolutos o relativos, lo cual hace en el primer caso que toda decisión basada en los mismos sea función del orden de magnitud que se maneja para cada variable. No obstante, aún tomando valores relativos, el mínimo necesario para la norma de las desviaciones, esto es, la cota de error admisible, podría estar afectado por el número de platos y el número de componentes, condicionando la generalidad del criterio.

Un método que permite salvar el inconveniente es usar el cociente entre dos normas consecutivas, el cual se aproxima a la unidad conforme se logra convergencia. Posee la desventaja de utilizar una iteración más para la verificación. Otro criterio consiste en evaluar la norma del vector de correcciones en lugar de las discrepancias, con lo cual se evita la dependencia del criterio de decisión con la cantidad de incógnitas asociadas.

Resolución numérica de la matriz Jacobiana

De acuerdo a lo expresado, la matriz Jacobiana tiene dimensiones $N \times (2 \times NC + 1)$, donde como hemos visto N es el número de platos y NC el de componentes. Se tiene entonces, por ejemplo, para *40* platos y *3* componentes un orden de *280*. Como se observa, a medida que se incrementa el número de componentes, aumenta el orden (*840* para *10* componentes).

Existen diversas maneras de resolver el sistema de ecuaciones cuya solución brinda el vector de incrementos para implementar el proceso iterativo. Dado que la matriz Jacobiana es tridiagonal en bloques, un método natural es la resolución por eliminación Gaussiana, utilizando una extensión del algoritmo de Thomas para matrices tridiagonales. Este método es simple en cuanto a su implementación computacional, ocupando además poca memoria puesto que trabaja con submatrices de la matriz general en el proceso de cálculo (ver Capítulo IV). En otras palabras, *no es necesario trabajar simultáneamente* con toda la matriz Jacobiana, ya que puede resolverse el sistema por bloques a medida que se obtienen las submatrices necesarias, según ya hemos comentado. Las consideraciones referentes a la estructura del Jacobiano se han realizado en la Sección (X.5.2.), por lo tanto, aquí se analiza el diagrama lógico para la resolución numérica del mismo.

Como se mencionó anteriormente, las derivadas de las funciones correspondientes al balance de materia (*M*), con respecto a las variables de iteración, son directas. Por el contrario, el cálculo de las derivadas de las funciones balance de energía (*EN*) y equilibrio (*E*) son más complicadas y se analizan a continuación.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Cálculo de las derivadas de la función discrepancia de energía con respecto a todas las variables

En general, es conveniente calcular las derivadas en forma analítica para minimizar el tiempo de cálculo. Esta opción obviamente implica obtener la ecuación analítica de la derivada para cada opción (método de estimación) de propiedades fisicoquímicas que pueda plantearse. La facilidad para llevar a cabo esta tarea depende fuertemente de la fisicoquímica empleada. En lo que sigue suponemos un esquema de cálculo basado en derivaciones numéricas, a los efectos de lograr validez general, a costa de mayor tiempo de cómputo.

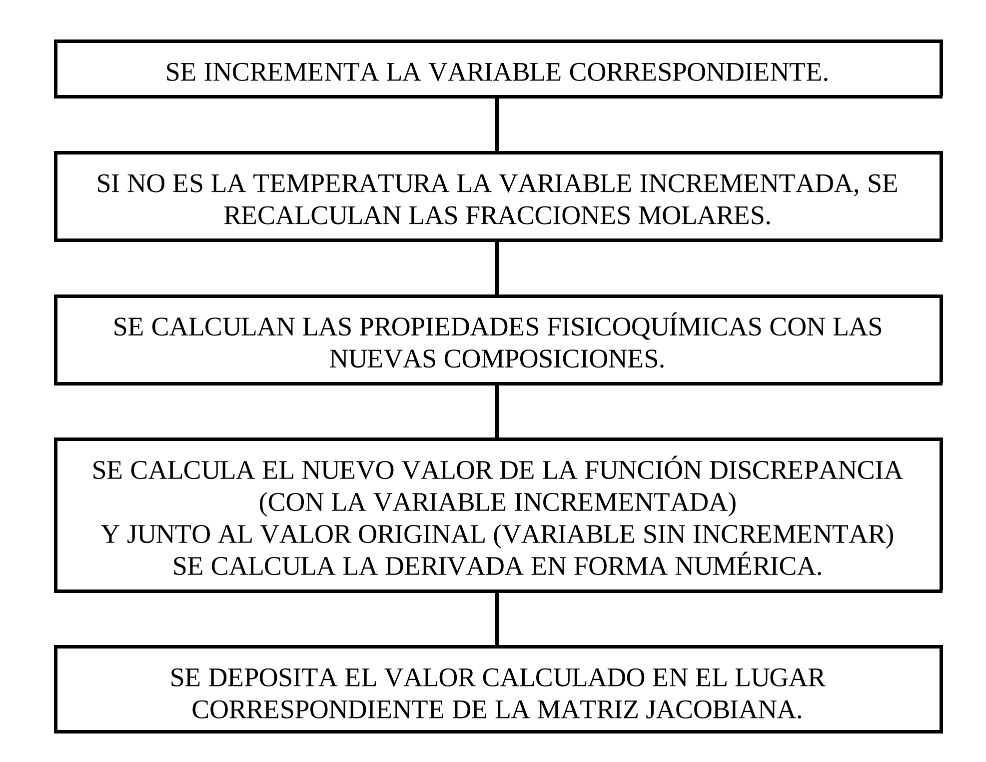


Figura X.11: Esquema lógico para el cálculo de las derivadas numéricas de las funciones discrepancias correspondientes al balance de energía.

Si se analiza la función discrepancia de energía del plato *i*, se observa que es función de todas las variables asociadas al mismo ($l_{i,j}$, T_i y $v_{i,j}$), la corriente líquida y su contenido entálpico correspondiente al plato anterior en la secuencia ($l_{i-1,j}$, HL_{i-1}) y la corriente vapor y su correspondiente contenido entálpico pertenecientes al plato

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

posterior en la secuencia ($v_{i+1,j}$; HV_{i+1}). En la Sección (X.5.2) obtuvimos dichas expresiones. Como sabemos, para resolverlas en forma numérica hay que evaluar la función y luego incrementar la variable independiente para obtener las derivadas según el esquema de la Figura (X.11).

Por otra parte, la función discrepancia de equilibrio es función de las variables del plato ($v_{i,j}$, T_i y $l_{i,j}$) y del caudal molar de la corriente gaseosa que proviene del plato posterior ($v_{i+1,j}$). Luego, en este caso, para individualizar las operaciones a realizar debe contemplarse un índice para indicar el componente para el cual se plantea la función discrepancia, el otro para referir a la etapa y por último, un tercer índice que indica la variable con respecto a la cual se deriva.

Debe tenerse en cuenta además, que cuando se incrementa el caudal molar de un componente, se deben recalcular para todos ellos (una vez modificados caudales de vapor o líquido) los valores de las nuevas fracciones molares. Similarmente se procede para calcular las restantes derivadas (según las expresiones obtenidas en la Sección (X.5.2)). Una vez finalizado el cálculo y completado la matriz Jacobiana debe procederse a su resolución. De acuerdo al procedimiento de Newton-Raphson se debe ahora calcular los valores de los incrementos ($\boldsymbol{\Delta X}$) para todas las variables independientes (v_{ij}, T_i y $l_{i,j}$). Para ello, como hemos visto, por ser una matriz tridiagonal en bloques, es conveniente utilizar la estructura especial para facilitar el cálculo. Esquemáticamente se procede según lo indica la Figura (X.12).

Debe tenerse en cuenta en programas modulares que forman parte de un sistema general, la posibilidad de no convergencia. Consecuentemente, es conveniente tomar un número de iteraciones máximas luego del cual (si no se verifica convergencia) se depositan en las corrientes de salida los últimos valores calculados. Por ejemplo, pueden tomarse *30* iteraciones. En este caso es necesario imprimir un mensaje de error para que el usuario decida el procedimiento a seguir.

Esto persigue dos objetivos. El primero es impedir, ante una mala incialización, que el programa prosiga el cálculo ininterrumpidamente, haciendo infinito el tiempo de cómputo, si no alcanzara convergencia. El segundo objetivo es el de permitir al usuario contar con los últimos datos calculados, ya que son de gran importancia para evaluar la situación.

Por otra parte, algunos simuladores dan la posibilidad que el cómputo prosiga aún después que alguno de los equipos (por ejemplo una columna de destilación) ha arribado al número máximo de iteraciones y no logra convergencia. Esto se basa en que el problema puede deberse a las condiciones de la(s) corriente(s) de alimentación a la torre; y al permitirse una nueva iteración de la planta completa, puede(n) mejorar sustancialmente (desde el punto de vista de su proximidad al valor solución) y por lo tanto permitir convergencia del equipo en la siguiente iteración de la planta completa.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

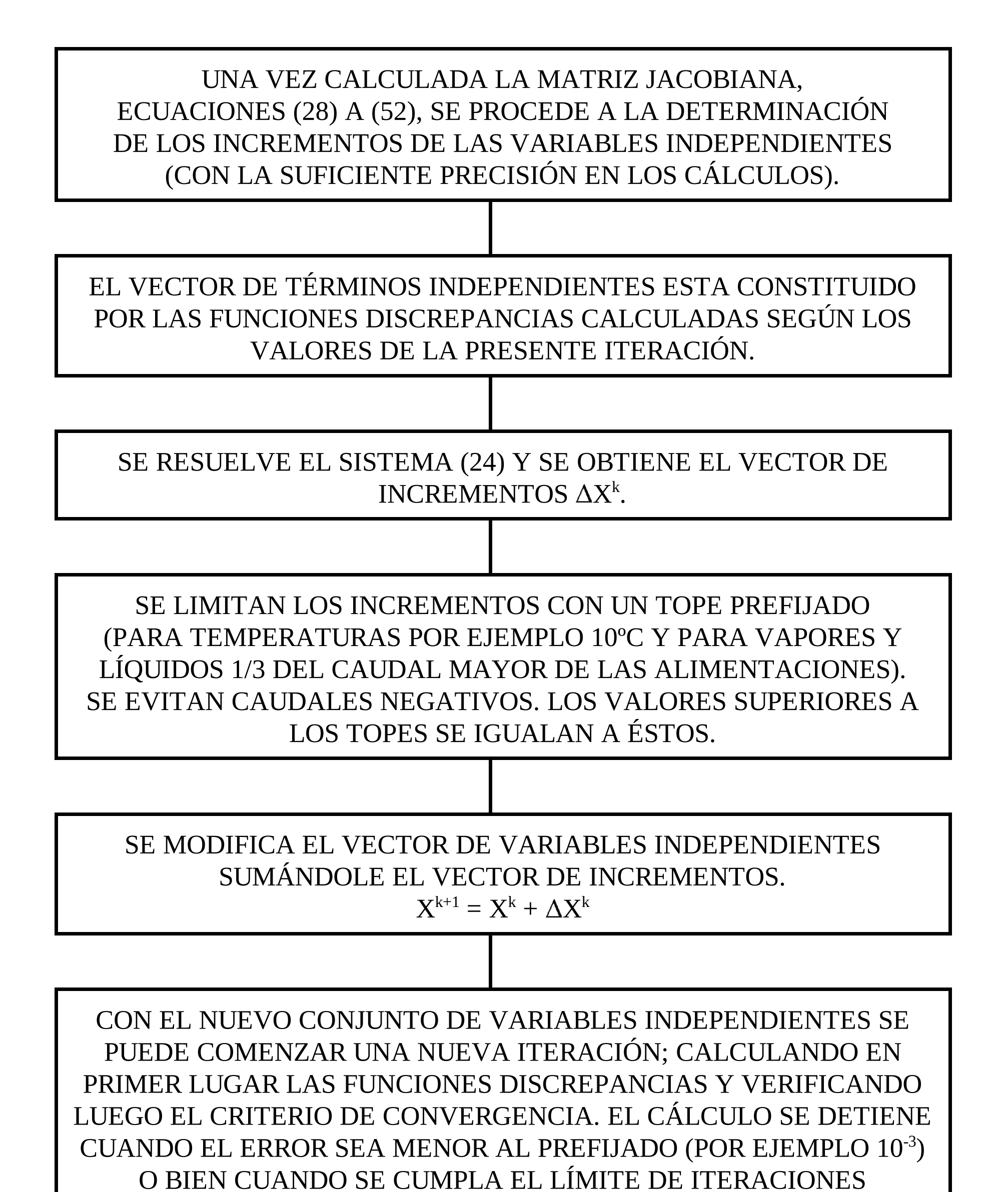


Figura X.12: Esquema lógico para el cálculo de la matriz Jacobiana.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

X.5.4 Opciones Estructurales

Como se ha mencionado en el listado de hipótesis, hasta aquí se adoptó una estructura tipo absorbedor/desorbedor o bien una columna de destilación con hervidor/condensador parcial. Además, se supuso sólo un conjunto de variables y/o parámetros de equipos específicos. Esto es así ya que consideramos la existencia de dos fases en equilibrio. Luego, se excluye un condensador total, por ejemplo.

En esta sección estudiaremos cómo introducir nuevas variantes estructurales, lo cual está íntimamente ligado con las variables operativas (especificaciones) del equipo y los grados de libertad del sistema.

Existen diversas variantes a considerar, por ejemplo, se pueden plantear, entre otras:

Condensador parcial

- Con carga calórica especificada.
- Con relación de reflujo especificada.
- Temperatura de destilado especificada.
- Caudal de destilado especificado.

Hervidor parcial

- Con carga calórica especificada.
- Con relación de vaporización especificada.
- Temperatura de fondo especificada.
- Caudal de fondo especificado.

Condensador total

- Temperatura y relación de reflujo especificada.
- Relación de reflujo, carga calórica especificada.
- Con ΔT (grado de subenfriamiento) y relación de reflujo especificados.

Fondos de torre, condensador / separador líquido-líquido, arrastre con vapor, etc.

El modelo introducido permite resolver la estructura indicada en la Figura (X.13a) según lo discutido en las secciones anteriores, donde las corrientes de extracción laterales pueden o no existir.

Nos proponemos ahora analizar estructuras como las indicadas en la Figura (X.13b), en las cuales se incorpora la existencia del hervidor y condensador al equipo de separación (torre de destilación).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

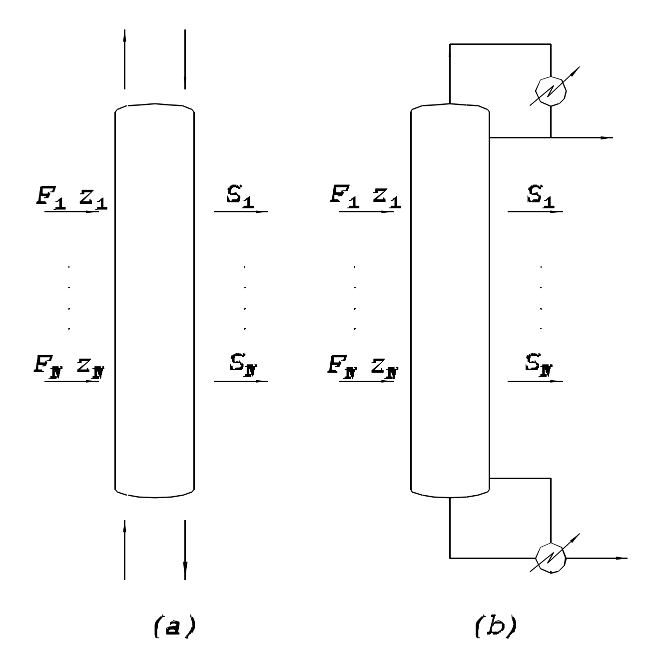


Figura X.13: (a) Absorbedor/desorbedor con múltiples alimentaciones y extracciones laterales. (b) Columna de destilación con múltiples alimentaciones (Na) y salidas (Ns).

Condensador parcial con carga calórica especificada

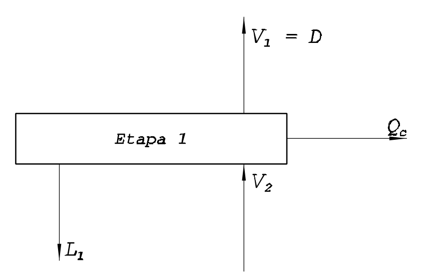


Figura X.14: Esquema de la etapa 1, considerada como un condensador parcial.

Dado que en el condensador parcial existe equilibrio de fases líquido-vapor, el condensador es considerado como una etapa de equilibrio más. En las Ecuaciones (17) (18) y (20) sólo es necesario adicionar la carga del condensador en el balance de energía del primer plato. Los demás parámetros no se modifican. Se supone que el producto de tope se encuentra como vapor y la totalidad del líquido proveniente del condensador se recicla a la torre. La carga del condensador, Q_c, es constante y por lo tanto no se alteran las derivadas obtenidas en la Sección (X.5.2). En este caso, la relación de reflujo surge como resultado del cálculo.

Condensador parcial con relación de reflujo especificada

A diferencia del caso anterior, la ecuación de balance de energía del plato *1* no puede utilizarse puesto que desconocemos Q_c. Dado que el sistema de ecuaciones y el número de incógnitas debe permanecer constante para mantener la compatibilidad, se debe reemplazar la ecuación del balance de energía por otra apropiada. En su reemplazo utilizamos por lo tanto la definición de la relación de reflujo. Para mayor claridad, en la Figura (X.14) se esquematiza el plato de tope (condensador parcial) con sus corrientes asociadas.

Se define como reflujo al cociente ($L_1 / V_1 = R$) en donde V_1 es el producto de tope (el destilado *D*). De aquí surge:

$$L_1 - RV_1 = EN_1 = \sum_{j=1}^{NC} 1_{1j} - R \sum_{j=1}^{NC} v_{1j} = 0 \qquad (52)$$

expresión que reemplaza al balance de energía convencional, para el plato de tope, según las especificaciones asignadas.

Por su naturaleza (existencia de 2 fases), son válidas las ecuaciones ya obtenidas para el esquema anterior a partir de las relaciones de equilibrio, por lo que no se presentan modificaciones. No obstante, los balances de materia para cada componente toman la siguiente forma:

$$\begin{gathered} 1_{1j} + v_{1j} - v_{2j} = M_{1j} = 0 \\ con\ j = 1,\ 2,\ ...,\ NC \end{gathered} \qquad (53)$$

De lo expuesto se deduce que existen cambios en las derivadas de energía correspondientes al plato de tope. Estas modificaciones resultan de derivar las nuevas ecuaciones introducidas:

Balance de energía:
Matrices tipo B

$$\frac{dEN_1}{dv_{1j}} = -R \ , \quad \frac{dNE_1}{dl_{1j}} = 1 \ , \quad \frac{dNE_1}{dT_1} = 0$$

Matrices tipo C

$$\frac{dNE_1}{dv_{2j}} = 0 \ , \quad \frac{dNE_1}{dT_2} = 0$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Balance de materia:
Matrices tipo B

$$\frac{dM_{1j}}{dv_{1j}} = 1 \ , \quad \frac{dM_{1j}}{dl_{1j}} = 1$$

Matrices tipo C

$$\frac{dM_{1j}}{dv_{1j}} = -1$$

Las derivadas de las relaciones de equilibrio no presentan alteraciones, excepto que a diferencia del planteo anterior (Sección (X.5.2)) las variables L_0 y V_{N+1} ya no están definidas.

Condensador parcial, temperatura especificada

Nuevamente, al igual que el caso anterior debe definirse una nueva ecuación. En este caso se sustituye la ecuación de energía en el primer plato por la siguiente expresión:

$$EN_1 = T_1 - T_{esp} = 0$$

que se debe cumplir en virtud de la especificación adoptada. Las otras ecuaciones no se modifican. En este caso las nuevas derivadas resultan:

Matriz tipo B

$$\frac{dEN_1}{dv_{1j}} = 0 \ , \quad \frac{dEN_1}{dT_1} = 1 \ , \quad \frac{dEN_1}{dl_{1j}} = 0$$

Matriz tipo C

$$\frac{dEN_1}{dv_{2j}} = 0 \ , \quad \frac{dEN_1}{dT_2} = 0$$

Condensador parcial, caudal de destilado especificado

En este caso se recurre a reemplazar la ecuación de energía del primer plato por la expresión que corresponde a la especificación del destilado:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$EN_1 = \sum_{j=1}^{NC} v_{1j} - D = 0 \tag{54}$$

Consecuentemente, las modificaciones en las derivadas que deben introducirse son las siguientes:

Matriz tipo B

$$\frac{dEN_1}{dv_{1j}} = 1 \ , \ \frac{dEN_1}{dT_1} = 0 \ , \ \frac{dEN_1}{dl_{1j}} = 0$$

Matriz tipo C

$$\frac{dEN_1}{dv_{2j}} = 0 \ , \ \frac{dEN_1}{dT_2} = 0$$

El resto de las derivadas no se modifica.

Hervidor parcial, carga calórica especificada

Análogamente al caso ya visto del condensador, no se presentan dificultades ya que el hervidor parcial es considerado como una etapa de equilibrio más (plato *N*).

Se considera que el producto extraído como fondo es líquido y la totalidad del vapor producido ingresa a la torre. Consecuentemente, el cálculo es inmediato.

Si se consideran hervidores y condensadores parciales en los cuales no se especifican los calores puestos en juego, entonces debe especificarse otra variable, como ser por ejemplo la relación de vaporización.

Hervidor parcial con relación de vaporización especificada

Para una mejor comprensión, se esquematiza el último plato (hervidor) con sus corrientes asociadas en la Figura (X.15).

Se define como R_V, (relación de vaporización) a la expresión:

$$R_V = \frac{V_N}{L_{N-1}} \tag{55}$$

Por lo tanto, en lugar de la ecuación de balance de energía del plato *N* ahora planteamos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$EN_N = V_N - L_{N-1} R_V = \sum_{j=1}^{NC} v_{Nj} - R_V \sum_{j=1}^{NC} l_{N-1,j} = 0 \qquad (56)$$

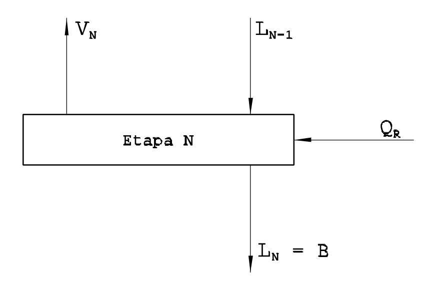


Figura X.15: Esquema de la etapa N, considerada como hervidor parcial.

En este caso son válidas las consideraciones realizadas para la opción del condensador equivalente, por lo que se debe contemplar las modificaciones de las derivadas correspondiente al plato N de una manera similar a la ya expuesta.

Hervidor parcial con temperatura especificada

Para este caso son válidas las consideraciones efectuadas para la opción equivalente (condensador parcial), modificándose lógicamente las ecuaciones del plato *N*. La función energía adopta la forma:

$$EN_N = T_N - T_{esp} = 0 \qquad (57)$$

Nuevamente, las derivadas se modifican según el esquema ya analizado para el caso equivalente.

Hervidor parcial, caudal de fondo especificado

En este caso se reemplaza la ecuación de energía del plato *N* por la expresión

$$EN_N = \sum_{j=1}^{NC} l_{Nj} - B = 0 \qquad (58)$$

Las derivadas deben modificarse de acuerdo al procedimiento ya visto en los casos anteriores.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Condensador total, temperatura y relación de reflujo especificada

En esta opción no existe equilibrio en el primer plato, ya que todo el vapor se condensa y no coexisten dos fases. La información de equilibrio, por lo tanto, no puede utilizarse. Consecuentemente, deberán incorporarse nuevas relaciones respecto a los casos anteriores a los efectos de mantener el número de incógnitas y ecuaciones en forma compatible (grados de libertad del sistema).

Dado que se especifica la temperatura, no se puede usar el balance de energía convencional para el primer plato ya que no conocemos la cantidad de calor Q_c. Recurrimos a reemplazar la ecuación del balance de energía por la relación que surge de la temperatura especificada, a los efectos de utilizar la información disponible.

$$EN_1 = T_{esp} - T_1 \qquad (59)$$

Por su parte, las ecuaciones correspondientes a los balances de materia se modifican de acuerdo al esquema siguiente (ver Figura (X.16)):

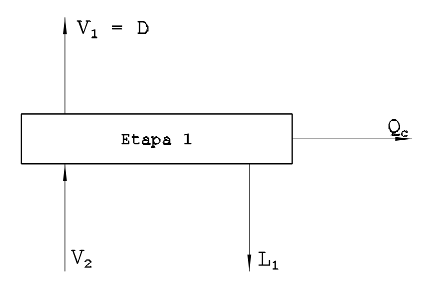


Figura X.16: Esquema de la etapa 1, considerada como condensador total. Relación de reflujo R definido como $R = L_1 / D$.

$$M_{1j} = l_{1j} + d_j - v_{2j} = l_{1j} + v_{1j} - v_{2j} = 0 \qquad (60)$$

Dado que se ha especificado la relación de reflujo, podemos introducir esta especificación a partir de su definición $R = L_1 / V_1$ ya que $V_1 = D$, el destilado producido. De esta manera, ya que esta relación no sólo se cumple para la corriente total sino para cada componente, se tiene, reemplazando en la Ecuación (60):

$$v_{1j}\ (1 + R) - v_{2j} = 0$$
$$con\ j = 1,\ 2,\ \ldots\ ,\ NC \qquad (61)$$

Las ecuaciones de equilibrio no pueden plantearse como se mencionó arriba,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ya que aquí no coexisten dos fases. Se debe encontrar otras *NC* ecuaciones independientes para reemplazarlas.

Debido a que V_1 y L_1 provienen de una misma corriente, sus composiciones son iguales y por lo tanto se pueden plantear (*NC - 1*) ecuaciones independientes que lo expresen. Se toman las (*NC - 1*) primeras componentes, ordenadas alfabéticamente.

$$EN_{1j} = x_{1j} - y_{1j} = \frac{l_{1j}}{\Sigma l_{1j}} - \frac{v_{1j}}{\Sigma v_{1j}} = l_{1j} - L_1 \, [v_{1j} \,/\, V_1] = 0 \qquad (62)$$

$$con \; j = 1, \, 2, \, ... \, , \, NC-1$$

La restante ecuación se obtiene de la definición de la relación de reflujo especificada *R*, notándose que es independiente respecto de las anteriores utilizadas.

$$E_{1,2NC+1} = L_1 - R \, V_1 = \sum_{j=1}^{NC} l_{1j} - R \sum_{j=1}^{NC} v_{1j} = 0 \qquad (63)$$

De lo expresado se deduce que las derivadas de las funciones representativas de la primer etapa sufren modificaciones respecto del caso base tratado en la sección anterior -absorbedor/desorbedor-.

Condensador total, relación de reflujo, carga calórica especificada

Dado que se ha especificado la carga calórica, la función que representa el balance de energía puede escribirse de la forma:

$$L_1 \, HL_1 + V_1 \, HV_1 - V_2 \, HV_2 + Q_c = 0 \qquad (64)$$

Las funciones discrepancia de materia y equilibrio son similares al caso recientemente planteado. Nuevamente, deberán modificarse las derivadas según corresponda en función de la Ecuación (64).

Condensador total a temperatura de subenfriamiento (ΔT) y relación de reflujo especificada

En este caso, si $\Delta T = 0$, se especifica la temperatura de burbuja. Aquí continúan siendo válidas las apreciaciones realizadas en los apartados anteriores correspondientes a condensadores totales, considerando no obstante las siguientes variantes:

Dado que no se conoce el valor del calor intercambiado, se toma la definición de relación de reflujo como ecuación que reemplaza al balance de energía.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$EN_1 = L_1 - R\ V_1 = 0 \qquad (65)$$

Se mantienen las ecuaciones que representan al balance de materia para cada componente y las (*NC - 1)* primeras relaciones de equilibrio, según lo detallado en los casos anteriores. Para el reemplazo de la última relación de equilibrio, no obstante, se toma la definición de temperatura de burbuja, teniendo en cuenta el sobre-enfriamiento especificado.

$$E_{1,NC+1} = 1 - \sum_{j=1}^{NC} \left(K_j^{T+\Delta T} \frac{l_{1j}}{L_1} \right) = 0 \qquad (66)$$

Otras especificaciones

Existen, además, posibilidades de plantear diversas variantes de operación. Para ello se expondrán a modo de ejemplo dos casos utilizados normalmente en la práctica industrial.

Consideración de fondos de torre

En este caso existe una corriente de vapor que alimenta al último plato (tomando el lugar del hervidor). Esta corriente aporta calor (al condensar en la columna) y además se constituye en un agente de arrastre que facilita cierto tipo de separaciones.

Para tener en cuenta esta posibilidad bastará tomar la opción de hervidor a flujo calórico especificado, reemplazando éste por el aporte entálpico que ingresa con el vapor agregado.

$$EN_N = L_N\ HL_N + V_N\ HV_N - F_V\ HF_V - L_{N-1}\ HL_{N-1} = 0 \qquad (67)$$

donde F_V representa el caudal de vapor alimentado en el último plato, y HV su entalpía específica.

Para las ecuaciones de balance de materia por componentes debe considerarse el mismo agregado.

$$M_{N,j} = v_{N,j} + l_{N,j} - l_{N-1,j} - F_j^V = 0 \qquad (68)$$

donde F_j^V representa el caudal de vapor incorporado. Dado que coexisten (se asume) dos fases en equilibrio, son aplicables las ecuaciones de dichas relaciones en la etapa N. Nótese que el vapor condensado no se asume como una nueva fase líquida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En cuanto a las derivadas, dado que el caudal ingresado es constante, no introduce modificaciones respecto del esquema representativo de hervidores parciales a carga calórica especificada. Aquí debe analizarse la posibilidad de formación de dos fases líquidas, al agregar agua a la mezcla que debe separarse. En este último caso deben realizarse modificaciones al cálculo, ya que como puede verse en el listado de hipótesis, se ha supuesto siempre una sola fase líquida en el desarrollo del modelo.

Consideración de equilibrio líquido-líquido en el condensador

Dado que existe equilibrio en la etapa en cuestión (etapa número uno que representa el condensador), puede adaptarse la situación al esquema propuesto para condensadores parciales; considerando obviamente que en este caso el producto V_1 se encuentra en fase líquida y las relaciones de equilibrio naturalmente se calculan para fase líquido-líquido.

Este esquema es útil en torres azeotrópicas, en las cuales la fase heterogénea en el condensador-separador es habitual.

Asimismo, la metodología expuesta puede emplearse para contemplar sistemas en los cuales existe equilibrio líquido-líquido en todas las etapas (como ocurre en extractores líquido-líquido). Sólo basta con tener en cuenta esta situación en el sistema de estimación de propiedades fisicoquímicas. Desde el punto de vista del modelo, sólo son necesarias modificaciones menores, *interpretando* las variables V como pertenecientes a una corriente líquida (por ejemplo, la menos densa), al igual que las composiciones y.

Debe remarcarse nuevamente que si el problema involucra la coexistencia de dos fases líquidas y una vapor, el modelo debe ser modificado para tomar en cuenta dicha situación con el planteo de los balances y relaciones de equilibrio correspondientes.

X.6 MÉTODOS JERÁRQUICOS CON DOS NIVELES DE ITERACIÓN (INSIDE-OUT)

Estos métodos fueron introducidos para lograr algoritmos a la vez de rigurosos, rápidos y flexibles. El primero de esta familia de algoritmos fue propuesto por Boston (1970) y Boston y Sullivan (1974). Luego se incorporaron numerosas modificaciones a los efectos de mejorar la eficiencia del algoritmo original, tanto en cuanto a la cantidad de opciones a especificar como a la velocidad de cálculo, por ejemplo, modificando sustancialmente la forma de inicialización.

Según vimos en la Sección (X.4), puede escribirse el balance de materia en forma matricial, tal que quede expresado en función de los caudales molares de vapor y de la temperatura, a través de la dependencia de la constante de equilibrio. Esta estrategia simplifica la metodología de resolución (el algoritmo de Thomas, que toma ventaja de la forma tridiagonal de la matriz para plantear la eliminación Gaussiana).

El problema radica en encontrar los flujos molares por cada componente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

dados los flujos molares totales (L_i y V_i) junto a la temperatura (para el cálculo de K_{ij}). Como vimos, estos algoritmos implican un gran número de iteraciones para mezclas áltamente no-ideales, en las cuales debe considerarse la dependencia de K_{ij} con las composiciones. Considerando simultáneamente todas las correcciones (el método de Tomich -ver Sección (X.5)) se evitan problemas de convergencia independientemente del tipo de mezcla a tratar (si existe una gran diferencia o no entre temperaturas de burbuja y rocío) pero se incrementa el tiempo de cómputo.

No obstante, ya mencionamos que la experiencia demuestra que el método de Tomich, si bien es bastante útil para mezclas ideales y semi no-ideales, tiene inconvenientes con las mezclas no-ideales. Más aún, en general exige una buena inicialización para lograr convergencia. Por último, el tiempo que involucra la inversión del Jacobiano es muy importante cuando el número de etapas supera 40, aproximadamente.

Para resolver varios de estos problemas, en los métodos *inside-out*, (o de doble jerarquía -de lazo interno y externo anidados-) a diferencia de los métodos basados en la corrección simultánea de todas las variables (el analizado en la sección anterior -Napthali y Sandholm, por ejemplo-); se utiliza una estrategia de aproximación de valores para la constante de equilibrio tomando una función aproximada con respecto a la temperatura, de tal forma de lograr minimizar el tiempo de cómputo en los cálculos de temperatura de burbuja o rocío (en el lazo interno). Por lo tanto, dada la temperatura, las constantes de equilibrio pueden calcularse directamente mediante la aproximación utilizada, la cual se supone lineal dependiendo de un coeficiente, el cual debe calcularse sólo en las iteraciones externas (lazo externo).

Sin entrar en detalles sobre el método, la estrategia principal descansa en el hecho que en general la presión de vapor de los componentes tiende a formar líneas aproximadamente paralelas cuando se las grafica en función de la temperatura. Luego, puede aproximarse el valor de la constante K_i de cada componente en función de la volatilidades relativas, α_i con respecto a uno definido como base, K_b. Este componente base puede tomarse como un pseudo-componente o componente medio, que surge de promediar alguna propiedad; por ejemplo (Boston y Sullivan, 1974):

$$\ln K_b = \sum \omega_i \ln K_i \qquad (69)$$

donde $\omega_i = t_i / \sum t_i$ con $i = 1, 2, ..., NC$.

$$t_i = y_i \frac{\partial(\ln K_i)}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)} \qquad (70)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la variación de K_b con la temperatura se adopta según la siguiente expresión:

$$\ln\ (K_b) = A - (B\ /\ T) \qquad (71)$$

donde A y B se determinan a partir de evaluaciones de K_b a diferentes temperaturas. Luego para cada componente:

$$K_i = \alpha_i\ K_b$$

con lo cual dado el valor de K_b los otros K_i son calculados rápidamente.

También puede procederse de la misma forma para el cálculo de las entalpías, esto es, utilizar funciones de aproximación para las mismas, dependiendo de coeficientes que deberán ser evaluados por cada iteración del lazo interno; para luego en el lazo externo utilizar métodos rigurosos.

En síntesis, en el lazo interno, utilizando la aproximación del cálculo de la constante de equilibrio (y de las entalpías) se resuelven los perfiles de temperatura y composiciones de vapor y líquido, que satisfacen todos los balances. Sin embargo, para cada solución del lazo interno debemos chequear los resultados utilizando las relaciones termodinámicas exactas. Esto se realiza en un lazo externo, habiéndose cumplido las anteriores operaciones en el lazo interno de cálculo. Es de destacarse que en el lazo externo se itera sobre las constantes de aproximación de las fórmulas de K_b (A y B), o las correspondientes a la aproximación de entalpías, y no sobre las propiedades en sí. Esta estrategia permite reducir en mucho el tiempo de cómputo total, que para problemas con un gran número de componentes y etapas es también una limitante en los métodos matriciales globales como el propuesto por Naphtali y Sandholm.

En el lazo externo, el principal factor a controlar es la convergencia de las nuevas composiciones y volatilidades relativas entre los componentes. Para ello se utilizan modelos fisicoquímicos rigurosos. Si no coinciden los valores de volatilidad relativa así calculados para todos los componentes, se generan nuevos valores, los cuales son utilizados en las aproximaciones anteriormente mencionadas, en el lazo interno.

Pueden existir varias estrategias para el cálculo de los coeficientes de las funciones de aproximación para el cálculo de los K_{ij}, dependiendo del grado de convergencia del perfil de temperaturas, la no-idealidad de la mezcla, etc.

Russel (1983) introduce algunas modificaciones al método de Boston y Sullivan para contemplar de manera más natural diversas especificaciones y acelerar la convergencia. Para ello reordena las variables a converger en el lazo interno y externo, logrando ciertas ventajas de performance.

En general, este último método, con ciertas modificaciones, está implementado en varios simuladores comerciales. Las modificaciones tienen como

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

objeto una estrategia adecuada de inicializaciones para cada opción (especificaciones) posible.

En forma genérica, en los simuladores comerciales disponibles en el mercado se encuentran habitualmente una familia de métodos provenientes de la estrategia de doble jerarquía o (*inside-out*), y variantes pertenecientes a la familia de métodos de corrección simultánea, como el analizado en la sección anterior, propuesto por Napthali y Sandholm (1970). Nuevamente, para este último caso se introducen variantes que contemplan métodos específicos de inicialización según las especificaciones, el número de componentes o etapas presentes, el tipo de configuración, etc.

Dentro de este contexto, los métodos semi-rigurosos expuestos en la Sección (X.4) no son, por lo general, presentados como una alternativa en los simuladores comerciales. Sin embargo, su utilidad se manifiesta en la incorporación de variantes particulares de los mismos que son utilizados específicamente en la generación del primer perfil (inicialización), en la familia de algoritmos de correcciones simultáneas, en los cuales como ya sabemos el punto inicial es muy importante.

X.7 MÉTODOS DE RELAJACIÓN

La principal diferencia de esta clase de métodos radica en que los balances de materia, y a veces también los de energía, se resuelven en forma no estacionaria. Se parte de una condición inicial conocida (temperaturas, caudales y composiciones para todas las etapas) y se resuelven las ecuaciones diferenciales y algebraicas correspondientes en forma numérica a los efectos de obtener los cambios en temperaturas de etapas, caudales y composiciones. El resultado buscado es el estado estacionario al cual se llega, y no las trayectorias temporales.

Los métodos de relajación han mostrado ser muy estables. Presentan el inconveniente de la convergencia lenta respecto a los otros. Su importancia radica en que permiten la aproximación de las condiciones transitorias que ocurren entre el tiempo en que se produce una perturbación y el tiempo en que se alcanza el nuevo estado de equilibrio o estacionario. También es posible que en casos en que la convergencia sea dificultosa para los métodos anteriores pueda lograrse convergencia por medio de esta filosofía.

Un análisis de los métodos para simulación dinámica de equipos de separación múltiple etapa se verá en el Capítulo XV.

X.8 MÚLTIPLES SOLUCIONES EN EQUIPOS DE SEPARACIÓN MULTICOMPONENTES MÚLTIPLE ETAPA

Dado que el sistema de ecuaciones pertenecientes al modelo que representa a los equipos de separación multicomponentes en cascadas múltiple-etapa es por lo general fuertemente no lineal, no debiera extrañar la posibilidad de obtener múltiples soluciones. Por ejemplo, modelos sencillos (pero no-lineales) como los reactores

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

exotérmicos son conocidos por la presencia de más de una solución en estado estacionario, planteándose luego problemas tales como la controlabilidad, estabilidad de los estados estacionarios, si es posible alcanzarlos con ciertas políticas de puesta en marcha, si son reales (es decir que se corresponden con el comportamiento experimental del sistema), etc.

Si bien en el área de reactores el tema es bastante conocido, no se ha avanzado lo suficiente en el campo de la destilación. En efecto, dado que sólo hace unas pocas décadas pueden resolverse rigurosamente modelos adecuados para mezclas multicomponentes de comportamiento no-ideal, no debe asombrarnos que recién a partir de los últimos años se haya comenzado a reportar en la bibliografía, y por lo tanto a estudiar profundamente la posibilidad de la existencia de múltiples estados estacionarios en destilación, tanto convencional como azeotrópica o reactiva. Si bien se adoptaron diferentes planteos teóricos para estudiar esta cuestión, se pensaba originalmente que aún cuando podrían existir múltiples soluciones, éstas serían no reales, ya que corresponderían a temperaturas o composiciones fuera del rango de trabajo. En efecto, dado que las composiciones están limitadas entre cero y uno y las temperaturas en destilación son fuertemente acotadas, era natural pensar de esta manera, esto es, una solución real y eventualmente otras con identidad sólo matemática.

Desde el punto de vista teórico, el primer problema a comprender es que no existe un método general para poder estimar cuándo un sistema de ecuaciones no lineales tiene más de una solución. Existen métodos matemáticos (homotopía) que permiten plantear un sistema de ecuaciones diferenciales asociado al modelo analizado, de tal forma de encontrar todos los estados estacionarios del mismo. Sin embargo, la discusión de tales métodos está fuera del alcance de esta obra y resultan costosos de implementar en términos de modelado y esfuerzo de cálculo. Por otra parte, no se puede garantizar, aún así, que se encuentren todos los estados estacionarios (soluciones) posibles. Así las cosas, el problema aún hoy está más cerca del arte que de la ciencia. En efecto, para sistemas de ecuaciones no-lineales complejos las múltiples soluciones son en general encontradas a través de *experimentos* numéricos, perturbando ciertos parámetros de inicialización a partir de soluciones ya halladas, recorriendo un lazo de histéresis, como se mostrará más adelante.

Magnusen y colaboradores (1979) en un interesante trabajo fueron los primeros en reportar múltiples estados estacionarios en destilación azeotrópica. Existen varias formas de definir las multiplicidades o múltiples estados estacionarios. Aquí consideramos múltiples estados estacionarios al fenómeno por el cual, dadas las especificaciones estructurales de la columna (número de platos, platos de alimentación y extracciones, etc.), y las condiciones operativas (caudal de reflujo, calor en el rehervidor, etc.), encontramos distintos perfiles internos (de composiciones, caudales, temperatura, etc.) que satisfacen todas las ecuaciones del modelo, *fijadas las*

composiciones de todas las corrientes de entrada. Nótese que podemos también estudiar el caso contrario, en el cual tenemos múltiples estados de entrada que se correspondan a un perfil de la columna en la solución.

En el caso de referencia, los autores reportaron tres estados estacionarios posibles para ciertas especificaciones de la columna. A partir de este trabajo, numerosos reportes aparecieron en la literatura especializada comunicando nuevos casos, en diversas mezclas y con distintas configuraciones. Por ejemplo, entre los casos recientes pueden citarse el trabajo de Beckiaris y colaboradores (1993) detectando múltiples soluciones para una columna que trata una mezcla azeotrópica. También se han encontrado múltiples soluciones en columnas que tratan mezclas semi-ideales (Jacobsen y Skogestad, 1990), o en columnas reactivas, como por ejemplo los casos publicados por (Ciric y Miao, 1994) para la obtención de etilen-glicol, y Nijhuis y colaboradores (1993) para una columna de obtención de MTBE (metil, terbutil éter, un aditivo para la gasolina).

A partir de estos hallazgos, muchos grupos de investigación han tratado de investigar las causas de las multiplicidades. Entre otras, se ha determinado que los siguientes son factores que inciden fuertemente en la posibilidad de encontrar múltiples soluciones al resolver un modelo correspondiente a cascadas múltiple-etapa procesando mezclas multicomponentes:

- El número de soluciones esperadas depende de los coeficientes de los términos no-lineales (que a su vez dependen de las especificaciones realizadas). Pequeñas variaciones en estos coeficientes pueden afectar drásticamente la presencia o no de múltiples estados estacionarios.
- La existencia de múltiples soluciones en el modelo puede estar condicionada por el tipo de método fisicoquímico utilizado para la estimación de las propiedades.
- La inicialización influye drásticamente en el tipo de solución encontrada. En casos en los cuales existen múltiples soluciones, pequeños cambios en las inicializaciones pueden provocar la convergencia hacia una de ellas en detrimento de las otras.
- Las múltiples soluciones pueden estar directamente influenciadas por la forma (curvatura) de los perfiles de composiciones, etapa a etapa (Bekiaris y colaboradores, 1993).

En lo que sigue, y a modo de ilustración, se reproducirán algunos resultados obtenidos en el trabajo de Benz y colaboradores (1997) en el cual se analiza la influencia de distintos factores presentes en el modelo para la posibilidad de la obtención de múltiples soluciones, o en otros términos, la sensibilidad de la presencia de las múltiples soluciones a distintos parámetros característicos del modelo. En este trabajo se analiza un caso típico reportado en la literatura (Beckiaris y colaboradores,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

1993); que consiste en una columna azeotrópica que procesa acetona, metanol y benceno, este último como agente de ruptura del azeótropo. Pueden obtenerse diferentes soluciones según el método empleado, ya sea desde el punto de vista de la estimación de las propiedades fisicoquímicas o del algoritmo propuesto para la simulación, y por último, los puntos de inicialización y la estrategia de resolución (técnica numérica) empleada.

En la Tabla (X.1) se indican los datos que caracterizan la columna bajo análisis.

Tabla X.1

ESPECIFICACIÓN	Relación de reflujo, calor entregado en el hervidor
Platos	44 (incluye rehervidor y condensador)
Condensador	Total
Alimentaciones	Agente de Arrastre (E): Benceno, plato: 40. Mezcla Azeotrópica: Acetona, heptano; plato: 40; composición molar: 0.9, 0.1; caudal: 100 kmol/min. Destilado = 90.9 Kmol/min
Método Fisicoquímico	UNIFAC, NRTL, WILSON, etc.

En la Figura (X.17) se indican diferentes resultados según sea el modelo utilizado.

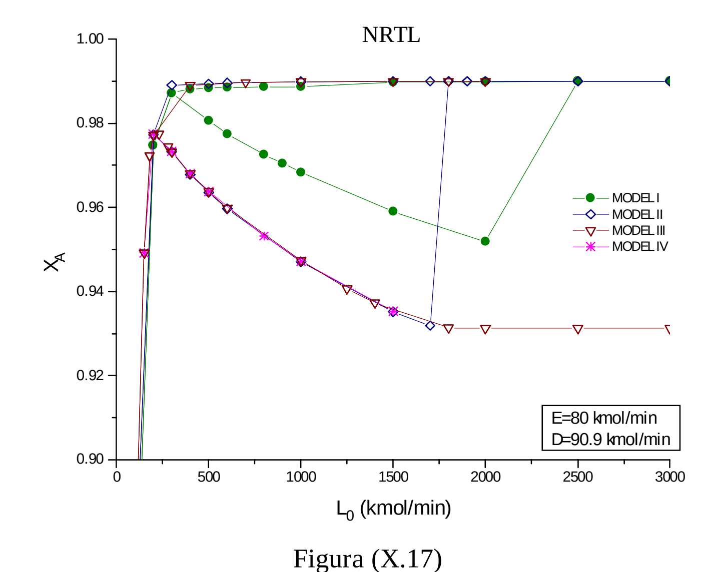


Figura (X.17)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Puede observarse que para cierto rango de valores L_0 (caudal reflujado a la torre) existen diferentes valores posibles de composición, X_A, del producto (destilado). La gráfica muestra que las ramas de *alta composición* o *baja composición* se obtienen a partir de distintos métodos de cálculo. No obstante, para este caso particular, también puede lograrse un diagrama similar utilizando un único algoritmo y variando los métodos de estimación para las propiedades fisicoquímicas. Aquí se emplean 4 algoritmos distintos, dos pertenecientes a la familia basada en la estrategia *inside-out* (Russel, 1983) y los otros basados en los métodos de corrección simultánea (Napthali-Sandholm, 1971). Como puede observarse, aún manteniendo un mismo método de estimación para las propiedades fisicoquímicas, se obtienen diferentes soluciones, según el método (algoritmo) de resolución empleado.

Por otra parte, la Figura (X.18) muestra que para un mismo algoritmo de cálculo, utilizando diversos métodos de estimación para las propiedades fisicoquímicas encontramos nuevamente los distintos estados estacionarios, según el método empleado. En el trabajo citado se han utilizado algoritmos implementados en simuladores comerciales (PRO II y HYSIM), al igual que las correlaciones fisicoquímicas correspondientes.

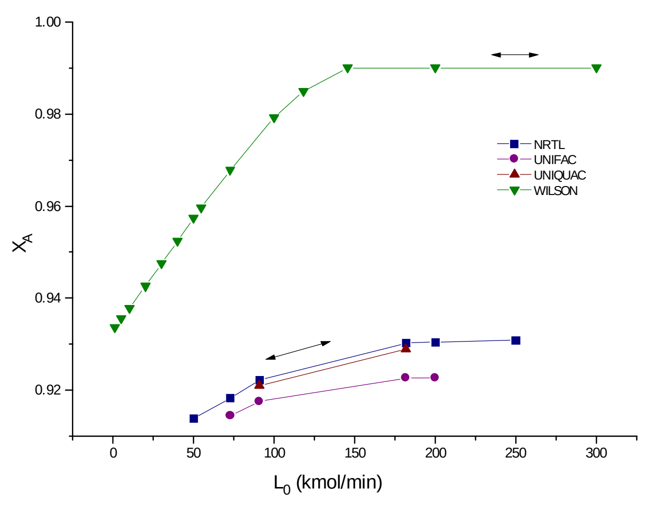


Figura X.18

Dentro de este contexto, cabe preguntarse si las soluciones son reales o bien un artilugio numérico, dependiendo del modelo adoptado. En este caso debemos comprender que cuando se introduce un cambio en el modelo fisicoquímico simplemente cambiamos el modelo, y por lo expresado más arriba, podemos encontrar o no en cada uno de ellos, múltiples soluciones. También sucede lo mismo para las

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

distintas hipótesis adoptadas, ya que involucran un cambio de modelo.

Por otra parte, si utilizamos un mismo modelo (riguroso) y además las mismas ecuaciones para la estimación de las propiedades fisicoquímicas, y encontramos múltiples estados estacionarios, entonces debemos suponer que todos ellos son soluciones al modelo (no el sistema real) planteado. Si hacemos que el modelo sea cada vez más riguroso (próximo al comportamiento real) y las soluciones aún subsisten, debemos deducir que existen muchas posibilidades acerca de la existencia de los múltiples estados estacionarios.

Para la verificación de los mismos, también podríamos utilizar simuladores dinámicos, ya que ellos no sólo nos indican los distintos estados finales obtenidos, sino también la trayectoria temporal seguida por las variables cuando *viajan* de un estado al otro. Además, puede estudiarse la estabilidad de cada solución.

Por otra parte, nos podríamos preguntar cómo alcanzar (de existir y ser estables) todos los estados estacionarios posibles en función de una política particular de arranque de la columna. Este punto será discutido en el Capítulo XV, utilizando lógicamente un simulador dinámico.

Obviamente, la única forma de verificar la existencia de los múltiples estados estacionarios para un sistema dado es recurriendo a la experimentación, hecho que debe realizarse en una planta piloto. Dorn y colaboradores (1997), han probado bajo ciertas condiciones, la existencia de múltiples estados estacionarios en una columna operando en una planta piloto.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Plantee relajar la hipótesis que asume la ausencia de reacciones químicas. ¿Qué debe modificarse en este caso y qué nuevos datos necesita para plantear el modelo? Escriba el sistema de ecuaciones resultante.

P2) ¿Cómo se puede tener en cuenta el calor intercambiado a través de las paredes de la columna considerando el cálculo de los respectivos coeficientes peliculares? ¿Complica esto el método de solución del sistema de ecuaciones?.

P3) ¿Cómo se puede contemplar en el modelo un extractor líquido-líquido?. ¿Es necesario modificar sustancialmente el modelo ya discutido?. ¿Y para un sistema que contiene dos fases líquidas y una vapor ?.

P4) ¿Los métodos rigurosos discutidos, aseguran convergencia cualquiera sea el punto de inicialización utilizado?. Teóricamente, cuando la mezcla es no-ideal, ¿puede demostrarse que la inicialización que toma un perfil lineal es menos adecuada que una estimada resolviendo el sistema con métodos semi-rigurosos?.

P5) Plantee un diagrama de flujos para confeccionar un programa que calcule una torre de destilación por el método propuesto por Napthali y Sandholm. Suponga que dispone de subrutinas para la estimación de las propiedades fisicoquímicas necesarias,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

al igual que los métodos numéricos de resolución de sistemas de ecuaciones algebraicas que necesite.

P6) ¿Se complica el planteo del modelo si se quiere resolver sistemas de columnas acopladas cualquiera sea las conexiones entre ellas? ¿Cuál es el problema más importante a resolver?. ¿Proviene de agregar nuevas variables o está asociado a la representación estructural del sistema?.

P7) Cuál es la razón por la cual puede esperarse que una columna de destilación tenga más de un estado estacionario?. ¿Qué puede hacer para confirmar si son reales?

P8) ¿Cuándo se justifica el uso de modelos simplificados para estimar costos de columnas de destilación?.

P9) ¿Puede utilizar el modelo discutido en este capítulo para verificar la performance de un lazo de control?. ¿Y para diseñar una columna batch?.

P10) Suponga que debe diseñar una columna con rellenos y dispone de un simulador con módulos como los discutidos en este capítulo. ¿Cómo debe proceder?.

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Billingsly, D. S., *On the Numerical Solution of Problems in Multicomponent Distillation at Steady State II*, AIChE J., Vol. 16(3), pág. 441 (1970).
- Billinglsy, D. S. y G. W. Boynton, *Interative Methods for Solving Problems in Multicomponent Distillation at the Steady State*, AIChE, J. Vol. 17 (1), pág. 65 (1971).
- Boston E. y S. Sullivan, *A New Class of Solution Methods for Multicomponent, Multistage Separation Processes*, Can. J. Chem. Engng., pág. 52 (1974).
- Boston E., *Inside-Out Algorithms for Multicomponent Separation Process Calculations*, ACS Symp. Ser., Nro. 124 (1980).
- Dorn, C., T. Gutlinger y M. Morari, *Experimental Study of Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation*, Proceedings of Distillation and Absorption ‘97, IChemE, Maastricht (1997).
- Economopoulos, A. P, *A Fast Computer Method for Distillation Calculations*, Chem. Eng., pág. 91 (1978).
- Friday, J. R. y B. D. Smith, *An Analysis of the Equilibrium stage Separation Problem-Formulation and Convergence*, AIChE J., Vol. 10 (5).

- Goldtein, R. P. y R. B. Stanfield, *Flexible Method for the Solution of Distillation Design Problems Using the Newton-Raphson Technique*, Ind. Eng. Che. Process Des. Dev., Vol. 9 (1), pág. 78 (1970).
- Ketchum, R. G., *A Combined Relaxation Method as a New Global Approach to the Computation of Thermal Separtation Processes*, Chem. Eng. Sci., Vol. 34, pág. 386 (1979).
- Koehler, J., P. Aguirre y E. Blass, *Minimun Reflux Calculations for Non-Ideal Mixtures Using the Reversible Distillation Model*, Chem. Eng. Sci., 46 (12), págs. 3007-3021 (1991).
- Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, Mc. Graw Hill Book Co., NY., pág. 254 (1962).
- Levy, S.G., D. B. Van Dogen y M. Doherthy, *Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillation. A Minimun Reflux Calculation for Non-ideal and Azeotropic Columns*, Ind. Eng. Chem. Fundam., 24, págs. 463-474 (1985).
- Lewis, W. K. y G. L. Matheson, End. Eng. Chem., 24, págs. 496-498 (1932).
- Naphtali, L. M y D. P. Sandholm, *Multicomponent Separation Calculations by Linearization*, AIChE J. (Vol. 16(1)), pág.148 (1971).
- Ohmura, S. y S. Kasahara, *New Distillation Calculation Method Utilizing Salient Features of Both Short-Cut and Tray-by-Tray Method-Semitray-by-Tray Method*, J. Chem. Eng. Japa, Vol. 11(13), pág. 185 (1978).
- Russel, R., *A Flexible and Reliable Method Solves Single Tower and Crude Distillation Column Problems*, Chem. Eng., 90, págs. 53-59 (1983).
- Thiele, E. W. y R. L. Geddes, Ind., Eng., Chem., 25, pág. 290 (1933).
- Tomich, T. F., *A New Simulation Method For Equilibrium Stage Process*, AIChE J. Vol. 16(2), pág. 229 (1970).
- Wang, J. C. y G. E. Henke, *Tridiagonal Matrix for Distillation*, Hydroc. Processing Vol. 45(8), pág. 155 (1966).
- Wang, J. C. et. al., *A Review on the Modeling and Simulation of Multi-Stage Separation Processes*, Foundations of Computer Aided Chemical Process Design, Eng. Foundation, NY (1981).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- King, J., *Separation Processes*, Mc. Graw-Hill, New York (1980).
- Henley, E. y J. D. Seader, *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*, John Wiley & E. Sons, New York (1981).
- Holland, C. D., *Fundamentals of Multicomponent Distilation*, Mc. Graw-Hill, New York.
- Pratt, H. R. C., *Countercurrent Separation Processes*, Elsevier Pub. Co., N.Y.
- Smith Buford, D., *Design of Equilibrium Stage Processes*, Mc. Graw Hill Book Co., N.Y.
- Van Winkle, M., *Distillation*, Mc. Graw-Hill, New York (1969).
- Mah, R. S. H. y W. Seider editores, *Foundations of Computer-Aided Chemical Process Desing*, Vol. I y II, Published by the Engineering Foundation, N.Y (1981).

CAPÍTULO XI

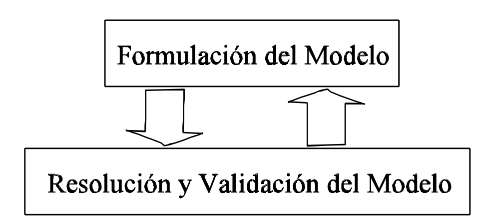
OPTIMIZACIÓN

Por
Marta B. Ferrero y Omar J. A. Chiotti

XI.1 INTRODUCCIÓN

El concepto de optimización data de tiempos inmemorables y fue incluido en la empresa cuando el mercado comprador que caracterizó las primeras décadas de la revolución industrial comenzó a transformarse hasta convertirse en el mercado vendedor fuertemente competitivo de nuestros días.

Se puede definir como optimización al proceso de seleccionar, a partir de un conjunto de alternativas posibles, aquella que mejor satisfaga el o los objetivos propuestos. Para resolver un problema de optimización se requieren dos etapas principales:



La formulación del modelo de optimización no es un procedimiento formal estructurado, sino más bien es un proceso que requiere de experiencia y creatividad. Una vez generado el modelo, la etapa siguiente es resolver y validar dicho modelo. Esta etapa puede considerarse suficientemente formalizada puesto que los modelos de problemas de optimización han sido muy estudiados y se han desarrollado innumerables métodos y estrategias para resolverlos. En este capítulo se describe una estrategia para formular el modelo y un ejemplo de aplicación. Posteriormente se presenta una descripción conceptual de la teoría y de los principales algoritmos asociados a un grupo particular de modelos matemáticos de optimización denominados *programación lineal y programación no lineal*.

XI.2 FORMULACIÓN DEL MODELO

Si bien, como se mencionara anteriormente, el proceso de modelado es esencialmente cualitativo y requiere de la habilidad y la experiencia de quien

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

desarrolla el modelo, en términos generales se pueden definir los siguientes pasos a seguir para la formulación del modelo:

Identificar las Variables de Decisión
Identificar y/o fijar las restricciones
Definición de los Objetivos
Análisis de la Información Disponible

Identificar las Variables de Decisión: Las variables de decisión representan las alternativas de decisión del problema. Pertenecen a la propia naturaleza del problema y no pueden ser establecidas arbitrariamente.

Identificar y/o fijar las restricciones: Las restricciones de un problema de optimización definen el conjunto de valores que pueden tomar las variables de decisión. En el caso de restricciones de igualdad, éstas además generan dependencia entre variables, reduciendo los grados de libertad del problema. El conjunto de todas las variables del problema se divide así en el subconjunto de variables independientes y el subconjunto de las variables dependientes.

Las restricciones pueden pertenecer a la naturaleza del problema, como lo son las restricciones físicas (límites de presión y temperatura, equilibrio liquido-vapor, etc.), pero también puede haber restricciones fijadas arbitrariamente por quien debe decidir, según su propio criterio.

Definición de los Objetivos: Los objetivos no pertenecen a la naturaleza del problema sino que son fijados arbitrariamente por quien debe decidir. El mismo puede definir un único objetivo o varios objetivos a ser considerados simultáneamente. Por ejemplo se suelen definir como objetivos: la rentabilidad del proceso, la calidad del producto, la seguridad del proceso, la satisfacción del cliente, etc. En este capítulo, sólo se considerarán los problemas con objetivo único. Para problemas con múltiples objetivos se puede consultar la bibliografía del final del capítulo.

Análisis de la Información Disponible: La información a cerca de los parámetros del proceso permitirá definir el criterio de decisión a adoptar. Si se conoce con certeza el valor de los parámetros, el criterio seleccionado será el de maximizar o minimizar el objetivo propuesto. En el extremo opuesto es posible encontrar parámetros cuyo valor es incierto. Usualmente en estos casos con algún criterio es posible definir para cada parámetro sujeto a incertidumbre un rango de valores posibles, quedando así definida una región paramétrica. Los criterios de decisión a utilizar en estos problemas son generalmente conservativos, aspirando a asegurar lo mejor para los peores valores que pueden ocurrir. Como ejemplo puede mencionarse el trabajo de Sargent & Grossmann 1983, quienes determinan la existencia de un punto paramétrico crítico (peor caso), tal que el diseño calculado para ese punto es factible para cualquier valor de la región paramétrica que puedan tomar los parámetros.

En el caso que para estos parámetros cuyo valor está sujeto a incertidumbre, se dispusiera de una función de densidad de probabilidad, el tomador de decisión

podría arriesgarse a tomar decisiones en función de esa información probabilística, adoptando como criterio de decisión optimizar el *valor esperado* del objetivo elegido.

Nuevamente, en virtud del carácter introductorio del presente capítulo, se limitará el desarrollo del tema a los problemas de optimización bajo certidumbre.

Adoptado el criterio de decisión, el paso que sigue es expresar las restricciones y el objetivo como funciones matemáticas de las variables de decisión. Se obtiene así un modelo matemático del problema de optimización. El modelo matemático resultante tendrá la siguiente estructura general:

$$\text{optimizar } f(x) \quad x \in R^n$$

sujeto a:

$$g_i(x) \leq b_i \qquad i=1,...,u$$
$$g_i(x) \geq b_i \qquad i= u+1,...,v$$
$$g_i(x)= b_i \qquad i=v+1,...,m$$

Donde $f(x)$ y $g_i(x)$ $\forall$ i = 1,...,m son funciones definidas en el espacio Real n-dimensional R^n. $f(x)$ es la *función objetivo* del modelo de optimización y $g_i(x)$ $(\leq, \geq, =)$ b_i $\forall$ i=1,...,m son las *restricciones* de desigualdad e igualdad del modelo.

Cuando la función objetivo y todas las restricciones son lineales esta estructura matemática se denomina modelo de Programación Lineal, (Linear Programming, LP), mientras que si al menos una de las funciones descriptas es no lineal, se denomina modelo de Programación No Lineal (Nonlinear Programmig, NLP). En el caso en que las variables del modelo son enteras, se denomina modelo de Programación Lineal Entero, (Integer Linear Programming, ILP) y modelo de Programación No Lineal Entero (Integer Nonlinear Programmig, INLP) respectivamente.

Puede ocurrir que el modelo posea variables continuas y enteras mezcladas, en este caso se denomina modelo de Programación Lineal Entero Mixto, (Mixed Integer Linear Programming, MILP) y modelo de Programación No Lineal Entero Mixto (Mixed Integer Nonlinear Programmig, MINLP) respectivamente. Es este el modelo asociado al problema general de diseño, según se vio en el capítulo II, con múltiples objetivos y generalmente con incertidumbre en la información. Cada tipo de modelo de programación matemática tiene asociado elementos teóricos y algoritmos particulares. Este capítulo presenta una breve descripción conceptual de elementos teóricos y algoritmos de los modelos LP y NLP exclusivamente.

Algunos conceptos asociados a los modelos matemáticos de optimización son los siguientes:

Región Factible: es el conjunto RF de puntos $x \in R^n$ que satisfacen simultáneamente todas las restricciones del Programa Matemático.

Punto Factible: es todo punto $x \in$ RF.

Punto No Factible: es todo punto $x \notin$ RF.

Solución Óptima del Modelo: es todo punto factible x^* que brinda el mejor valor de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la función objetivo. x^* es un punto óptimo y $f(x^*)$ el valor óptimo de la función objetivo. Es necesario destacar aquí que el concepto de óptimo está asociado al modelo y no al problema. Es decir, el óptimo corresponde al modelo y podrá aproximar más o menos bien al óptimo del problema dependiendo de cuan bien el modelo representa al problema de optimización en cuestión.

Con el propósito de explicar mejor los conceptos anteriores, se incluye el siguiente ejemplo.

XI.2.1 EJEMPLO: Planificación de Producción de una Refinería.

Una refinería de petróleo produce cuatro cortes intermedios de naftas, los cuales deben posteriormente ser mezclados para producir dos tipos comerciales de combustibles: común y extra. Cada corte posee un índice de performance que define la calidad del mismo, un máximo de disponibilidad y un costo unitario fijo. Los dos combustibles a producir tienen especificado un valor mínimo del índice de performance, un precio de venta conocido, y el mezclado tiene asociado un costo fijo conocido. Las obligaciones contractuales imponen una cantidad mínima a entregar de cada tipo de combustible, mientras que los excedentes de cada producto o de cortes intermedios pueden ser vendidos en el mercado libre a los precios estipulados por el mismo.

Las tablas siguientes muestran los valores de todos los parámetros del problema para un período de tiempo de un mes.

Tabla 1

Corte	Disponibilidad * b_i[bar/m]	Indica Perfor. a_i	Precio de venta $C1_i$**	Costo del corte $C2_i$**	Costo de mezclado $C3_i$**
1	3	73	32	27	1.5
2	3	80	37	31	1.5
3	5	92	42	36.5	2
4	6	98	59	42.5	2

* la disponibilidad está expresada en 10^5 barriles por mes.
** el precio de venta y los costos están expresados en $ por barriles.

Tabla 2

Producto	Mínimo a entregar s/contrato d_j[bar/m]*	Mínimo índice Perfor. f_j	Precio de venta s/contrato $v1_j$**	Precio de venta al mercado $V2_j$**
común	3	73	32	27
extra	3	80	37	31

* la disponibilidad está expresada en 10^5 barriles por mes.
** el precio de venta y los costos están expresados en $ por barriles.

XI.2.1.1 Modelado del Ejemplo

Variables de decisión: en el problema en consideración es posible decidir para cada corte intermedio la cantidad a vender directamente y la cantidad a mezclar para producir los combustibles común y extra. También es posible decidir para cada uno de los combustibles la cantidad a producir, la cantidad a vender por contrato y la cantidad a vender al mercado. Se identifican entonces las siguientes variables:
X_{ji}: cantidad del corte i a mezclar para producir combustible j [bar/mes]
Xv_i: cantidad del corte i a vender directamente [bar/mes]
Yc_j: cantidad del combustible j a vender por contrato [bar/mes]
Ym_j: cantidad del combustible j a vender al mercado [bar/mes]

Restricciones: Las restricciones a ser consideradas en este problema son las resultantes de los balances de materiales, las que aseguran el valor mínimo del índice de performance de los productos, las que aseguran los montos mínimos de ventas de los contratos y las que aseguran la satisfacción de las disponibilidades de cada tipo de corte intermedio a ser mezclado.

Balance de materiales para cada corte intermedio i:

$$\Sigma_j X_{ji} + Xv_i \leq b_i \qquad \forall\ i=1,...,4$$

Balance de materiales para cada combustible j a producir:

$$\Sigma_i X_{ji} = Yc_j + Ym_j \qquad \forall\ j=1,2$$

Valor mínimo del índice de performance de los productos:

$$\Sigma_i\ a_i X_{ji} \geq f_j (Yc_j + Ym_j) \qquad \forall\ j=1,2$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Cantidad mínima de combustible a vender según contrato:

$Yc_j \geq d_j \quad \forall\, j=1,2$

Restricción de no negatividad de las variables (un valor negativo de las variables que intervienen en este problema no tienen sentido físico):

$X_{ji} \geq 0 \quad \forall\, j=1,2 \quad \forall\, i=1,...,4$
$Yc_j \geq 0 \quad \forall\, j=1,2$
$Ym_j \geq 0 \quad \forall\, j=1,2$

Función objetivo: para este problema, se definirá como tal a una función que proporcione el Beneficio Neto = (Ventas) - (Costos). Las ventas están conformadas por la venta de cada uno de los combustibles más la venta directa de cortes. Los costos están constituidos por los costos de cada uno de los cortes más los costos de mezclado.

Análisis de la información disponible: en este problema se ha supuesto que todos los parámetros se conocen con certeza, luego el criterio de decisión a utilizar será maximizar la función Beneficio Neto.

La función objetivo expresada en términos de las variables de decisión resultará en:

Beneficio Neto = $\Sigma_j V1_j Yc_j + \Sigma_j V2_j Ym_j + \Sigma_i C1_i Xv_i - \Sigma_i C2_i (\Sigma_j X_{ji} + Xv_i) - \Sigma_i C3_i \Sigma_j X_{ji}$

Finalmente, el modelo matemático de optimización resultante será:

Maximizar $32Yc_1 + 37Yc_2 + 27Ym_1 + 31Ym_2 + 32\, Xv_1 + 37\, Xv_2 + 42\, Xv_3 + 59\, Xv_4 - 28{,}50\, X_{11} - 32{,}50\, X_{12} - 38{,}50\, X_{13} - 44{,}50\, X_{14} - 28{,}50\, X_{21} - 32{,}50\, X_{22} - 38{,}50\, X_{23} - 44{,}50\, X_{24} - 27Xv_1 - 31Xv_2 - 36{,}50\, Xv_3 - 42{,}50\, Xv_4$

Sujeto a:

$X_{11} + Xv_1 \leq 3$
$X_{12} + Xv_2 \leq 3$
$X_{13} + Xv_3 \leq 5$
$X_{14} + Xv_4 \leq 6$
$X_{21} + Xv_1 \leq 3$
$X_{22} + Xv_2 \leq 3$
$X_{23} + Xv_3 \leq 5$
$X_{24} + Xv_4 \leq 6$
$\Sigma_i X_{ji} = Yc_j + Ym_j \quad \forall\, j=1,2$
$3\, X_{11} + 80\, X_{12} + 92\, X_{13} + 98\, X_{14} \geq 73\, (Yc_1 + Ym_1)$
$73\, X_{21} + 80\, X_{22} + 92\, X_{23} + 98\, X_{24} \geq 73\, (Yc_2 + Ym_2)$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$Yc_1 \geq 3$
$Yc_2 \geq 3$
$X_{ji} \geq 0 \quad \forall\ j=1,2 \quad \forall\ i=1,...,4$
$Ym_j \geq 0 \quad \forall\ j=1,2$

El modelo de optimización resultante es un modelo de Programación Lineal. La etapa que sigue es resolver el LP utilizando algún algoritmo apropiado y luego validar el modelo.

En las siguientes secciones se presenta un breve estudio de los modelos de programación matemática lineal (LP) y no lineal (NLP) y los principales algoritmos diseñados para resolver dichos modelos.

XI.3 TEORÍA Y ALGORITMOS DE OPTIMIZACIÓN

La resolución de los modelos de programación matemática fue abordada inicialmente desde una óptica matemática rigurosa, utilizando principalmente elementos de álgebra y análisis matemático. Surgieron así importantes principios, los cuales establecen las condiciones necesarias y suficientes que deben verificarse para poder asegurar que un punto es óptimo de un programa matemático. Estos postulados teóricos no fueron útiles como tales al momento de resolver los programas matemáticos que modelan problemas reales de optimización.

Ante la necesidad de disponer de una herramienta para resolver los problemas reales y con el advenimiento de la computadora, comenzaron a desarrollarse los algoritmos de optimización. Estos son derivados inicialmente más de la heurística que de la matemática. Los algoritmos son hoy poderosas herramientas para la resolución de los modelos de optimización de problemas reales.

Es de destacar que, si bien los elementos teóricos no constituyen una herramienta práctica para la resolución de los modelos de optimización, definen un marco conceptual importante para el desarrollo de los algoritmos de optimización y su aplicación, como así también para el modelado de un problema de optimización y su resolución. Sería casi imposible modelar y resolver un problema de optimización real sin conocer ciertos conceptos teóricos, por más que se disponga de un poderoso software de optimización.

XI.3.1 Programación Lineal

El modelo LP es extensamente utilizado en casi todas las áreas del conocimiento. La relación lineal entre variables le confiere la particularidad de ser un modelo fácil de generar y simple de resolver y analizar. Esto permite automatizar el proceso de generación del modelo, por lo cual es posible generar grandes modelos LP. Publicaciones recientes han reportado trabajos con modelos LP de más de cien mil variables.

A efectos de visualizar la simplicidad de un modelo LP, se realiza una representación gráfica con la cual se analiza el modelo y su solución. En cuanto a la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

resolución de un LP, el algoritmo convencional ampliamente utilizado es el método SIMPLEX diseñado por Dantzig en la década del cincuenta. En la década del ochenta se ha publicitado el método de Karmarkar como un nuevo y poderoso algoritmo para resolver LP, el cual reemplazaría al SIMPLEX. Dicho algoritmo por el momento permanece en el olvido, siendo universalmente usado el SIMPLEX.

XI.3.1.1 Representación y Solución Gráfica del LP

Desde el punto de vista didáctico, resulta conveniente realizar un análisis gráfico del procedimiento de resolución de un LP. Con esta finalidad se considera el siguiente ejemplo:

max $x_0 = 2x_1 + 4x_2$

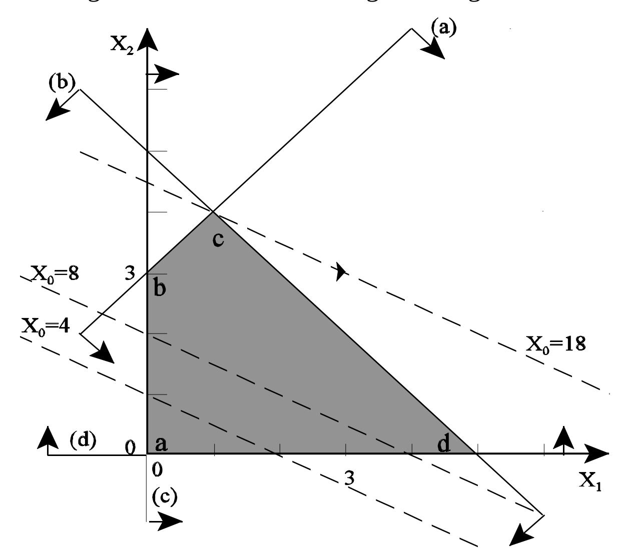
s.a.:

$-x_1 + x_2 \leq 3$ (a)

$x_1 + x_2 \leq 5$ (b)

$x_1 \geq 0,\ x_2 \geq 0$ (c), (d)

La representación gráfica se muestra en la siguiente figura:



El plano asociado a cada restricción, divide al espacio en un semiespacio factible (conjunto de punto que verifican la restricción) y un semiespacio no factible (conjunto de puntos que no verifican la restricción). La intersección de todos los semiespacios factibles (si es no vacío y acotado) define un poliedro (el conjunto de puntos que satisface simultáneamente todas las restricciones), el cual representa la región factible del LP. Dicho poliedro se representa sombreado en el gráfico.

De todos los puntos del poliedro, habrá al menos uno que asigna a la función

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

objetivo del LP el máximo valor. Dicho punto es la solución óptima del LP. Para determinar este punto se procede del siguiente modo:

- Se asigna al plano que define la función objetivo un valor arbitrario, en el ejemplo se asignó $x_0 = 4$, esto define en R^2 una recta. Se puede ver en el gráfico que existen aún infinitos puntos factibles que asignan a la función objetivo dicho valor.
- Asignando luego un segundo valor arbitrario mayor que el anterior, en el ejemplo se asignó $x_0 = 8$, se obtiene una segunda recta, paralela a la anterior. Del gráfico se observa que existen infinitos puntos factibles que asignan a la función objetivo este mayor valor. Luego, es fácil deducir que el máximo del problema corresponderá a una recta paralela a las anteriores, desplazada lo máximo posible en el sentido de crecimiento de la función objetivo, la cual incluya al menos un punto factible. Esta es la recta $x_0=18$ en el gráfico, la cual incluye el punto factible $x^*=(x_1;x_2)=(1;4)$. Este es el punto factible que asigna el mejor (máximo) valor a la función objetivo, por lo tanto es el punto óptimo, y $x_0=18$ es el valor óptimo (máximo) de la función objetivo.

Si se analizan distintas funciones objetivos (lineales) manteniendo la región factible, es fácil ver que el óptimo siempre corresponde a un vértice del poliedro. Esto permite inferir la siguiente conclusión: *el óptimo de un LP cuya región factible es no vacía y acotada estará siempre asociado a un punto extremo (vértice del poliedro) de la misma.*

Algunas particularidades que pueden presentarse en un modelo LP son las siguientes:

- Si la región factible es vacía esto significa que el LP no tiene solución. *Se dice que el LP es infactible.*
- Si la región factible es no acotada en la dirección en la cual la función objetivo es optimizada, lo cual ocurriría si en el ejemplo anterior se elimina la restricción (b), es fácil ver que el máximo valor de la función objetivo es infinito. *En este caso se dice que el LP es no acotado*.
- Si la recta correspondiente a la función objetivo es paralela a la recta correspondiente a una restricción sobre la que se encuentra el extremo óptimo, en este caso todos los puntos extremos localizados sobre dicha restricción serán óptimos. Asimismo serán también óptimos todos los puntos factibles localizados sobre dicha restricción. *En este caso, se dice que el LP tiene soluciones óptimas alternativas.* En el ejemplo anterior, esto ocurre si la función objetivo a maximizar fuese $x_0 = 2x_1+2x_2$, en este caso los puntos extremos x_c y x_d (vértices c y d) asignan a la función objetivo el valor máximo $x_0=10$. Del mismo modo, todo punto $x=\theta x_c+(1-\theta) x_d \ \forall \ \theta\in[0,1]$ será también un óptimo local alternativo.

Todo LP puede ser representado por la siguiente estructura general, conocida como *formato estandar*:

$$\max \quad x_0 = c^T x \qquad x\in R^n$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

s.a:

$$Ax = b$$
$$x \geq 0$$

Donde A(mxn) es una matriz de coeficientes, b(mx1) es el vector de términos independientes de las restricciones para el cual se verifica $b_i \geq 0 \ \forall$ i=1,...,m, c(nx1) es el vector de coeficientes de la función objetivo, x(nx1) es el vector de variables y m<n.

Para el ejemplo anterior, el formato estandar es el siguiente:

$$\max \quad x_0 = 2x_1 + 4x_2 + 0x_3 + 0x_4$$

s.a.:

$$-x_1 + x_2 + x_3 \qquad = 3$$
$$x_1 + x_2 \qquad + x_4 = 5$$
$$x_1, \ x_2, \ x_3, \ x_4 \geq 0$$

Donde x_3, x_4 son variables que se agregaron para transformar las inecuaciones en ecuaciones. Se denominan *variables de holgura*.

Dado un LP en el formato estandar, si el Rango(A,b)=m es posible deducir:

1 Dado que posee m restricciones de igualdad linealmente independientes, el sistema de ecuaciones Ax=b tiene n-m variables independientes (grados de libertad) que serán identificadas con el vector $x_N \in R^{n-m}$ y m variables dependientes que se identificarán con el vector $x_B \in R^m$. Luego $x^T = (x_B^T, x_N^T)$.

2 Desde el punto de vista geométrico (recordar análisis gráfico), dado que las restricciones de un LP son hiperplanos definidos en R^n, es fácil deducir que la región factible resultante de la intersección de dichos hiperplanos si existe y es acotada será un hiperpoliedro en R^n. Luego, dado que la función objetivo es también un hiperplano en R^n, siempre exitirá un vértice del hiperpoliedro factible que maximiza y otro que minimiza el hiperplano de la función objetivo. En otros términos, el óptimo de un LP cuya región factible es no vacía y acotada estará siempre asociado a un punto extremo (vértice del hiperpoliedro) de la misma.

3 Desde el punto de vista algebraico se puede demostrar que un punto de la región factible tiene al menos n-m variables iguales a 0 y todas las restantes positivas (condición de no negatividad de las variables, $x \geq 0$) si y solo si es un punto extremo de la misma.

Como ejemplo se analizan algunos puntos (soluciones factibles) del ejemplo anterior, para el cual (n-m)=2.

x_a=(0;0;3;5) punto extremo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

x_b=(0;3;0;2) punto extremo
x_c=(1;4;0;0) punto extremo
x_d=(5;0;8;0) punto extremo
x_e=(0;2;1;3) punto de frontera
x_f=(2;2;3;1) punto interior

Es fácil ver que los puntos extremos son los únicos que tienen al menos dos variables iguales a cero.

4 Siendo finito el número de restricciones de un PL, el número de vértices del hiperpoliedro factible será finito.

Luego, de estas cuatro consideraciones es posible deducir:

- La región factible de un LP si es no vacía y acotada tendrá un número finito de puntos extremos (vértices).

- El óptimo de un LP siempre está asociado a un punto extremo de la región factible.

- Dada la región factible Ax=b, $x \geq 0$ del LP en su forma estandar, si se verifica que cualesquiera m columnas de la matriz A son linealmente independiente, es posible representar la matriz de coeficientes como A=(B,N) siendo B una matriz (mxm) no singular y N una matriz (mx(n-m)). B se denomina matriz *Básica* y N se denomina matriz *No Básica.* Las variables asociadas a cada columna de la matriz B son las variables dependientes x_B y se denominan *variables básicas*, mientras que las variables asociadas a cada columna de la matriz N son las variables independientes x_N y se denominan *variables no básicas*. Luego, la región factible del LP en forma estandar queda expresada como: $(B,N)(x_B,x_N)^T=b$, $(x_B,x_N) \geq 0$, o bien $Bx_B+Nx_N=b$, $x_N \geq 0$, $x_B \geq 0$. Siendo la matriz B no singular, la B^{-1} existe, luego premultiplicando la ecuación anterior por B^{-1} se tiene: $x_B=B^{-1}b-B^{-1}Nx_N$.

- Todo punto extremo de la región factible puede ser determinado algebraicamente asignando arbitrariamente valor cero a n-m variables (independientes), luego calculando el valor de las restantes variables (dependientes) y descartando finalmente toda solución que no cumpla la condición de no negatividad ($x_B \geq 0$). Este punto se denomina *solución básica factible.* Luego, la solución obtenida asignando x_N=0 y calculando $x_B=B^{-1}b$, si $x_B \geq 0$ será una *solución básica factible del LP en el formato estandar*. En particular dicha solución se denomina *no degenerada* si x_B>0.

En base a estas consideraciones se ha desarrollado un método de búsqueda del óptimo de LP denominado SIMPLEX, el cual es muy eficiente y robusto (aplicable a todo LP). Este método se basa en dos condiciones fundamentales:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Condición de factibilidad: esta condición asegura que partiendo de una solución básica factible inicial sólo se analicen nuevas soluciones básicas factibles.

Condición de optimicidad: esta condición asegura que sólo se evaluarán soluciones básicas factibles no inferiores. Esto es, soluciones básicas factibles que asignan a la función objetivo un valor no inferior al asignado por la solución actual.

Convergencia del método: Si la región factible de un LP es no vacía y acotada tiene un número finito de puntos extremos (vértices), luego, dado que el método sólo evalúa vértices no inferiores, necesariamente (en ausencia de degeneración) el método alcanzará un óptimo en un número finito de iteraciones.

XI.3.1.2 El algoritmo SIMPLEX

Etapa Inicial

Se puede definir a la región factible del LP en la forma estandar como el conjunto de puntos $S=\{x \ / \ Ax=b, \ x\geq 0\}$. Sea $x\in S$ una *solución básica factible no degenerada inicial* del LP. Luego, el vector no básico asociado a dicha solución será $x_N=0$ y el vector básico asociado será $x_B=B^{-1}b-B^{-1}Nx_N=B^{-1}b>0$, siendo la matriz B la base asociada a dicha solución.

Etapa principal

Dada una solución básica factible $x\in S$, si dicha solución es no óptima, el método genera una nueva solución básica factible eligiendo una variable no básica x_{Nj} (con valor actual cero) y la convierte en variable básica (incrementando su valor), en reemplazo de una variable básica x_{Bi} (con valor actual mayor que cero) la que pasa a no básica (tomando valor cero).

La variable x_{Nj} que pasa a x_{Bi} se denomina *variable ingresante* a la base.

La variable x_{Bi} que pasa a x_{Nj} se denomina *variable saliente* de la base.

Esta operación es realizada en base a la *condición de optimicidad* y a la *condición de factibilidad* definidas en forma conceptual anteriormente, cuya operatoria se describe a continuación.

Condición de optimicidad

El valor actual de la función objetivo vendrá dado por $x_0=c_Bx_B+c_Nx_N=c_B(B^{-1}b-B^{-1}Nx_N)+c_Nx_N = c_BB^{-1}b-(c_BB^{-1}N-c_N)x_N$ o bien $x_0= c_BB^{-1}b-\Sigma_{j\in J}(c_BB^{-1}a_j-c_j)x_j$ siendo J el conjunto de subíndices de las variables No básicas y a_j la columna de A asociada a la variable x_j. Un análisis del valor de $(c_BB^{-1}a_j-c_j)$ permite deducir (para problemas de maximización):

- Si $(c_BB^{-1}a_j-c_j)\geq 0 \ \forall \ j\in J \Rightarrow$ cualquier x_j No básica que ingrese a la base no mejorará el valor de la función objetivo, luego *el punto actual es óptimo* (condición de parada del algoritmo)
- Si $(c_BB^{-1}a_j-c_j)<0$ para algún $j\in J$, x_j será candidata a ingresar a la base puesto que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

al aumentar el valor de x_j puede mejorar el valor de la función objetivo. De todas las x_j / $j \in J$ con valor $(c_B B^{-1} a_j - c_j) < 0$ se elige como *variable ingresante* aquella cuyo valor de $(c_B B^{-1} a_j - c_j)$ sea menor.

Si se elige como una solución básica factible inicial el vértice x_a del ejemplo anterior, se tiene que $x_B=(x_3,x_4)$ y $x_N=(x_1,x_2)$. Luego,

$$B = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{vmatrix} \qquad N = \begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$$

$c_B=(0;0)$, $c_N=(2;4)$, $b=(3;5)$, $x_N=(x_1,x_2)=(0;0)$
Por lo tanto, $x_B=B^{-1}b=(3;5)$ y $x_0=c_B x_B + c_N x_N = 0$.

Determinación de la *variable ingresante* en el ejemplo anterior:
Se calcula $(c_B B^{-1} a_j - c_j)$ para $j \in \{1,2\}$
Para j=1 $(c_B B^{-1} a_1 - c_1) = -2 \Rightarrow x_1$ es candidata a ingresar a la base
Para j=2 $(c_B B^{-1} a_2 - c_2) = -4 \Rightarrow x_2$ es candidata a ingresar a la base
No verifica la condición de óptimo.
Ambas variables son candidatas a ingresar a la base. Se elige la que tiene el potencial de producir la mayor mejora, esto es, la que posee el menor valor de $(c_B B^{-1} a_j - c_j)$. Por lo tanto se elige a x_2 como la variable ingresante.

Condición de factibilidad
Selecciona la *variable saliente* en base a satisfacer:
(1) La condición de no negatividad, $x \geq 0$.
(2) La condición de solución básica $\Rightarrow$ la variable saliente debe tomar valor cero.

Luego, siendo x_j / $j \in J$ la variable ingresante (su valor aumentará desde el actual cero), con lo cual el nuevo valor del vector de variables básicas vendrá dado por $x_B=B^{-1}b-B^{-1}a_j x_j$. Las restantes variables no básicas se mantendrán con valor cero.
Sea x_{Bi} el i-ésimo elemento del vector de variables básicas x_B (mx1). Luego, la condición (1) establece que $x_{Bi} = (B^{-1}b)_i - (B^{-1}a_j)_i \, x_j \geq 0 \; \forall \; i=1,...,m$.
Por otra parte, la condición (2) exige que la variable saliente x_{Br} debe tomar valor cero.
Estas condiciones se satisfacen eligiendo el valor de x_j (variable ingresante) como: $x_j = \min_i \{(B^{-1}b)_i / (B^{-1}a_j)_i \;\; \forall \; (B^{-1}a_j)_i > 0\} = (B^{-1}b)_r / (B^{-1}a_j)_r$
Luego, la variable no básica x_j ingresa a la base con valor $(B^{-1}b)_r / (B^{-1}a_j)_r$ y la variable básica x_{Br} sale de la base y toma valor cero (pasa a no básica).

Se habrá generado así una nueva solución básica factible no inferior a la anterior. El procedimiento vuelve a la *condición de optimicidad*.

Determinación de la *variable saliente* en el ejemplo anterior:
Se calcula $\min_i \{(B^{-1}b)_i / (B^{-1}a_j)_i \;\; \forall \; (B^{-1}a_j)_i > 0,\}$ para i=1,2 (i-ésimo elemento de x_B) y j=2 (variable ingresante)
Para i=1 $(B^{-1}b)_1 / (B^{-1}a_2)_1 = 3$
Para i=2 $(B^{-1}b)_2 / (B^{-1}a_2)_2 = 5$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Luego $min_i\{3;5\}=3$ que corresponde a j=3 ⇒ x_3 es la *variable saliente*
x_2 ingresa a la base con valor $x_2=min_i\{3;5\}=3$
Se genera así una nueva solución básica factible x para la cual, $x_B=(x_2,x_4)$ y $x_N=(x_1,x_3)$

$$B=\begin{vmatrix}1 & 0\\ 1 & 1\end{vmatrix} \qquad N=\begin{vmatrix}-1 & 1\\ 1 & 0\end{vmatrix}$$

$c_B=(4;0)$, $c_N=(2;0)$, $b=(3;5)$, $x_N=(x_1,x_3)=(0;0)$
Por lo tanto, $x_B=(x_2,x_4)=B^{-1}b=(3;2)$ y $x_0=c_Bx_B+c_Nx_N=12$

Se ha generado así una nueva solución básica factible que mejoró el valor de la función objetivo. x_0 incrementó su valor de 0 a 12. Puede verse en el gráfico que el algoritmo pasó del punto extremo x_a al punto extremo x_b. Repitiendo este procedimiento, desde el vértice x_b pasará al vértice x_c el cual es el óptimo.

Es necesario destacar que aquí se ha descripto la estrategia básica del algoritmo. Existen varias versiones del algoritmo desarrolladas en base a esta estrategia las cuales involucran desde estructuras en forma de tabla de cálculos hasta estructuras vectoriales compactas que explotan la relación de compromiso entre, complejidad del algoritmo, número de operaciones, espacio de operación y almacenamiento de datos y problemas de cálculos numéricos. Esto es muy importante en los LP de gran tamaño, en los cuales la matriz A tiene generalmente un elevado porcentaje de elementos nulos.

El Algoritmo Simplex es el único método masivamente difundido y utilizado en todo el mundo para la resolución de LP. Actualmente hay muchos softwares comerciales que han implementado el mismo. A modo de ejemplo podemos mencionar LINDO, XA, ZOOM y WHAT'S BEST!. También para problemas de menor tamaño es posible utilizar el algoritmo Simplex implementado en planillas de cálculo tales como QuatroPro y Excel.

XI.3.2 Programación No Lineal

A diferencia de lo que ocurre con los LP en los cuales el óptimo siempre corresponde a un vértice de la región factible, lo cual implica un número finito de puntos de búsqueda, en los NLP cualquiera de los infinitos puntos de la región factible puede ser un óptimo. Además, es común la presencia de óptimos locales. Estas características dificultan considerablemente la estrategia de resolución de los NLP. Según se indicó al comienzo del capítulo, inicialmente los NLP fueron estudiados desde la perspectiva de la matemática, dando origen a postulados teóricos que establecen condiciones necesarias y suficientes que verifica un punto óptimo (local o global) del problema. Estos postulados teóricos conocidos como la *Teoría Clásica de los NLP*, si bien son elementos conceptuales muy importantes, por su complejidad, no constituyen herramientas prácticas para resolver los NLP. Por esta razón, con el avance de la informática, surgieron *algoritmos* de optimización, desarrollados en base a razonamiento principalmente heurístico, que se constituyeron en herramientas eficientes y robustas para la resolución de NLP. En las secciones siguientes, se

presenta una descripción conceptual de los principales postulados de la teoría clásica y posteriormente de los algoritmos básicos de optimización.

En el Apéndice de fin de capítulo se presentan algunas definiciones que se utilizan en el desarrollo de las siguientes secciones.

XI.3.2.1 Teoría Clásica de la Programación No Lineal

A efectos de presentar los resultados teóricos, los NLP son clasificados en: NLP No condicionados (sin restricciones), NLP condicionados por igualdades y NLP condicionados por desigualdades. Los postulados teóricos son presentados a través del enunciado de teoremas sin demostración. Los resultados de los teoremas son aplicados a ejemplos académicos.

XI.3.2.1.1 Programas Matemáticos no Condicionados

Este tipo de NLP es representado a través de la siguiente estructura general: opt f(x) s.a:$\{x \in R^n\}$.

Teorema XI.1: *Condición Necesaria de Optimo Local No Condicionado*
Sea $f: R^n \rightarrow R^1$ continua y diferenciable en todo $x \in R^n$. Luego si x^* es un punto (finito) donde la función alcanza un óptimo local, se verifica $\nabla f(x^*)=0$. En particular, se dice que x^* es un óptimo local no condicionado.

Teorema XI.2: *Condición Suficiente de Optimo Local No Condicionado*
Sea $f: R^n \rightarrow R^1$ continua y diferenciable dos veces en todo $x \in R^n$. Si todas las primeras derivadas de f(x) se anulan en x^*, y si la matriz Hessiana evaluada en x^* es negativa (*positiva*) definida, luego x^* es un máximo (*mínimo*) local de f.
Extensión: Si x^* es un máximo (*mínimo*) local no condicionado de f(x), luego la matriz Hessiana evaluada en x^* es negativa (*positiva*) definida o semidefinida.

Teorema XI.3: *Condición Suficiente de Optimo Global No Condicionado*
Sea $f: R^n \rightarrow R^1$ continua y diferenciable dos veces y convexa (*cóncava*) $\forall\, x \in R^n$. Luego, todo mínimo (*máximo*) local de f(x) es global.

Ejemplo: Dado el NLP:

$$Opt\ f(x) = x_1^4 - 4x_1^3 + 4x_1^2 + x_2^4 - x_2^3 - 6x_2^2$$

encontrar máximos y mínimos.

Resolución: Por condición necesaria de óptimo local no condicionado (Teorema XI.1) se tiene:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\nabla f(x^*) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f(x^*)}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f(x^*)}{\partial x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4x_1^3 - 12x_1^2 + 8x_1 \\ 4x_2^3 - 3x_2^2 - 12x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones:

$$4x_1(x_1^2 - 3x_1 + 2) = 0 \qquad ①$$
$$x_2(4x_2^2 - 3x_2 - 12) = 0 \qquad ②$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones resultante se obtienen las siguientes soluciones: x_1^*= (0; 0); x_2^*= (0; 2,147) ; x_3^*= (0; -1,397) ; x_4^*= (2; 0); x_5^*= (2; 2,147); x_6^*= (2; -1,397); x_7^*= (1; 0) ; x_8^*= (1; 2,147) ; x_9^*= (1; -1,397)
Luego, existen nueve puntos del dominio de la función que verifican las condiciones necesarias de óptimo local no condicionado.

A continuación se analiza si verifican la condición suficiente de óptimo local no condicionado (Teorema XI.2), la cual requiere evaluar, en cada uno de los puntos anteriores, la matriz Hessiana definida en el Apéndice de fin de capítulo:

$$Hf(x^*) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_1 x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_1 x_2} \\ \dfrac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_2 x_1} & \dfrac{\partial^2 f(x^*)}{\partial x_2 x_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12x_1^2 - 24x_1 + 8 & 0 \\ 0 & 12x_2^2 - 6x_2 - 12 \end{bmatrix}$$

$$H|_{x_1^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & -12 \end{bmatrix} \qquad h_{11} > 0 \quad |H| = -96 < 0 \rightarrow \textit{no verifica}$$

Luego, x_1^*= (0;0) no verifica la condición suficiente de óptimo local no condicionado.

$$H|_{x_2^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 30{,}43 \end{bmatrix} \qquad h_{11} > 0 \quad |H| = 243{,}4 > 0 \rightarrow H \textit{ es positiva definida}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Luego, x_2^*=(0; 2,147) es un mínimo local.

$$H|_{x_3^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 19,80 \end{bmatrix} \qquad h_{11}>0 \qquad |H|=158,4>0 \;\rightarrow\; H \;\; es \;\; positiva \;\; definida$$

Luego, x_3^* = (0; -1,397) es un mínimo local.

$$H|_{x_4^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad h_{11}>0 \qquad |H|=0 \;\rightarrow\; H \;\; es \;\; positiva \;\; semidefinida$$

Luego, x_4^*=(2; 0) no verifica condición suficiente. No obstante, por extensión del Teorema XI.2, es posible que x_4^* sea un óptimo local.

$$H|_{x_5^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 30,43 \end{bmatrix} \qquad h_{11}>0 \qquad |H|=243,4>0 \;\rightarrow\; H \;\; es \;\; positiva \;\; definida$$

Luego x_5^*= (2; 2,147) es un mínimo local

$$H|_{x_6^*} = \begin{bmatrix} 8 & 0 \\ 0 & 19,80 \end{bmatrix} \qquad h_{11}>0 \qquad |H|=158,4>0 \;\rightarrow\; H \;\; es \;\; positiva \;\; definida$$

Luego, x_6^*= (2; -1,397) es un mínimo local

$$H|_{x_7^*} = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & -12 \end{bmatrix} \qquad h_{11}<0 \qquad |H|=48>0 \;\rightarrow\; H \;\; es \;\; negativa \;\; definida$$

Luego, x_7^* = (1; 0) es un máximo local

$$H|_{x_8^*} = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & 30,43 \end{bmatrix} \qquad h_{11}<0 \qquad |H|=-122<0 \;\rightarrow\; H \;\; no \;\; verifica \;\; definición$$

Luego x_8^* = (1; 2,147) no verifica condición suficiente

$$H|_{x_9^*} = \begin{bmatrix} -4 & 0 \\ 0 & 19,80 \end{bmatrix} \qquad h_{11}<0 \qquad |H|=-79,2<0 \;\rightarrow\; H \;\; no \;\; verifica \;\; definición$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Luego $x_9^* = (1; -1,397)$ no verifica condición suficiente.

Como la función no es cóncava, ni convexa (Apéndice de final de capítulo) no verifica la condición suficiente de óptimo global no condicionado, Teorema XI.3.

XI.3.2.1.2 Programas Matemáticos Condicionados por Igualdades.

Este tipo de NLP es representado a través de la siguiente estructura general: opt f(x) s.a:$\{x \in R^n,\ g_i(x)=b_i\ \forall\ i=1,..,m\}$ siendo $f:R^n \rightarrow R^1$ y $g_i:R^n \rightarrow R^1\ \forall\ i=1,..,m$ donde m<n.

Sea $x^* \in R^n$ un óptimo local de este PNL, se define a la matriz (mxm) Jacobiana $J(x^*)$ como:

$$J(x^*) = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_1} ; \ldots ; \dfrac{\partial g_1(x^*)}{\partial x_m} \\ . \qquad\qquad . \\ \dfrac{\partial g_m(x^*)}{\partial x_1} ; \ldots ; \dfrac{\partial g_m(x^*)}{\partial x_m} \end{bmatrix}$$

Teorema XI.4: *Condición necesaria de óptimo local restringido por igualdades.*

Sea $x^* \in R^n$ un óptimo local de f(x) sujeto a las restricciones de igualdad $g_i(x^*)=b_i$, $\forall$ i=1,...,m donde m<n. Si es posible elegir m variables tal que la matriz Jacobiana $J(x^*)$ sea no singular, $\exists$ un único conjunto de escalares $\lambda_1^*,...,\lambda_m^*$ satisfaciendo: $\nabla f(x^*) - \sum_{\forall i} \lambda_i^* \nabla g_i(x^*) = 0$.

La función Lagrangiana: Este sistema de ecuaciones puede obtenerse como condición necesaria de óptimo local del NLP no condicionado:

$$\text{opt } L(x,\lambda) = f(x^*) - \sum_{\forall i} \lambda_i^* (gi(x^*)-b_i)$$

Sea (x^*, λ^*) óptimo local de $L(x,\lambda)$, luego debe verificar la condición necesaria de óptimo local no condicionado (Teorema XI.1) $\nabla L(x^*,\lambda^*)=0$. Esto es:

$$\nabla_x L(x^*,\lambda^*) = \nabla f(x^*) - \sum_{\forall i} \lambda_i^* \nabla gi(x^*) = 0$$

$$\partial L(x^*,\lambda^*)/\partial \lambda_i = (gi(x^*) - b_i) = 0 \quad \forall\ i=1,...,m$$

donde $\nabla_x L(x^*,\lambda^*)$ es un vector que contiene las derivadas parciales de $L(x,\lambda)$ respecto a x_j $\forall$ j=1,…,n.

Luego se puede decir que este problema irrestricto es equivalente al problema anterior en cuanto a que toda solución óptima de ambos problemas satisface el mismo conjunto de ecuaciones. $L(x,\lambda)$ se denomina función Lagrangiana y los λ_i $\forall$ i=1,...,m se denominan multiplicadores de Lagrange.

Teorema XI.5: *Condición suficiente de óptimo local restringido por igualdades.*

Sea $f(x):R^n \rightarrow R^1$ y $g_i(x):R^n \rightarrow R^1$ $\forall$ i=1,...,m continua y diferenciable dos veces en todo $x \in N_\delta(x^*)$ (entorno del punto x^* de radio δ). Sean $x^* \in R^n$ y $\lambda^* \in R^m$ /$\nabla L(x^*,\lambda^*)=0$. Si $\exists$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$z \in E^n$ no nulo cumpliendo $z^T \nabla g_i(x^*)=0\ \forall\ i=1,...,m$, el cual satisface $z^T H_x L(x^*,\lambda^*) z > 0 \Rightarrow x^*$ es un mínimo local estricto del problema: opt f(x) s.a:$\{x \in R^n,\ g_i(x)=b_i\ \forall\ i=1,..,m\}$. Si $z^T H_x L(x^*,\lambda^*) z<0 \Rightarrow x^*$ es un máximo local estricto del problema: opt f(x) s.a:$\{x \in R^n,\ g_i(x)=b_i\ \forall\ i=1,..,m\}$.

Ejemplo: Dado el NLP:

$$Opt\ f(x) = (5-x_1)^2 + x_2^2$$
$$s.a: \quad (1-x_1)^2 + x_2^2 = 9$$

se buscan máximos y mínimos.

Resolución: Por condición necesaria de óptimo local condicionado por igualdades (Teorema XI.4), derivada a través del problema equivalente, se tiene:

$$L(x,\lambda) = (5-x_1)^2 + x_2^2 - \lambda[(1-x_1)^2 + x_2^2 - 9]$$

$$\nabla L(x*) = 0 \quad \Rightarrow \quad -2(5-x_1) + 2\lambda(1-x_1) = 0$$
$$2x_2 - 2\lambda x_2 = 0$$
$$(1-x_1)^2 + x_2^2 - 9 = 0$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones resultante se obtienen las siguientes soluciones: $x_1^* = (4;\ 0;\ -1/3)$; $x_2^* = (-2;\ 0;\ 7/3)$

Luego, existen dos puntos que verifican las condiciones necesarias de óptimo local restringido por igualdades.

A continuación se analiza si dichos puntos verifican la condición suficiente de óptimo local restringido por igualdades (Teorema XI.5):

$$Debe \exists \ \ z \varepsilon R^2 \ \ no \ \ nulo \ / \ z^T \nabla g(x*) = 0 \quad \Rightarrow \quad (z_1;z_2)\begin{bmatrix} -2(1-x_1) \\ 2x_2 \end{bmatrix} = 0$$

$$[z_1;z_2]H_x L(x^*)\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = [z_1;z_2]\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 L(x^*)}{\partial x_1 x_1} & \dfrac{\partial^2 L(x^*)}{\partial x_1 x_2} \\ \dfrac{\partial^2 L(x^*)}{\partial x_2 x_1} & \dfrac{\partial^2 L(x^*)}{\partial x_2 x_2} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = [z_1;z_2]\begin{bmatrix} 2-2\lambda & 0 \\ 0 & 2-2\lambda \end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix} = 0$$

Para $x_1^* = (4;\ 0;\ -1/3)$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$(z_1;z_2)\begin{bmatrix}6\\0\end{bmatrix}=0 \quad \Rightarrow \; se\ verifica\ \forall\ z\ no\ nulo/\ z_1=0\ y\ z_2\neq 0$$

$$[z_1;z_2]H_xL(x^*)\begin{bmatrix}z_1\\z_2\end{bmatrix}=[z_1;z_2]\begin{bmatrix}8/3 & 0\\0 & 8/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}z_1\\z_2\end{bmatrix}=8/3z_2^2>0 \quad \forall \quad z_2\neq 0$$

Por lo tanto, x_1^* = (4; 0; -1/3) es un mínimo local estricto del problema.

Para x_2^*= (-2; 0; 7/3)

$$(z_1;z_2)\begin{bmatrix}-6\\0\end{bmatrix}=0 \quad \Rightarrow \; se\ verifica\ \forall\ z\ no\ nulo/\ z_1=0\ y\ z_2\neq 0$$

Luego:

$$[z_1;z_2]H_xL(x^*)\begin{bmatrix}z_1\\z_2\end{bmatrix}=[z_1;z_2]\begin{bmatrix}-8/3 & 0\\0 & -8/3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}z_1\\z_2\end{bmatrix}=-8/3z_2^2<0 \quad \forall \quad z_2\neq 0$$

Por lo tanto, x_2^* = (-2; 0; 7/3) es un máximo local estricto del problema.

XI.3.2.1.3 Problemas Condicionados por Desigualdades

Este tipo de NLP puede ser representado a través de la siguiente estructura general: max f(x) s.a:{$x\in R^n$, $g_i(x)\leq b_i$ $\forall$i=1,..,m} siendo $f:R^n\rightarrow R^1$ y $g_i:R^n\rightarrow R^1$ $\forall$ i=1,..,m. Todo NLP puede ser llevado a esta estructura, por lo tanto los teoremas siguientes son de aplicación general.

Teorema XI.6: *Condición Necesaria de Optimo Local de Kuhn Tucker.*
Sea x^* un máximo local restringido de f(x) sobre la región factible definida por $g_i(x)\leq b_i$ $\forall$ i=1,...,m, donde f(x) y $g_i(x)$ $\forall$ i=1,...,m son continuas y diferenciables. Si los $\nabla g_i(x^*)$ $\forall$ i=1,...,m son linealmente independientes, luego $\exists$ $\lambda^*=(\lambda_1^*,..,\lambda_m^*)$ tal que:

$$\nabla f(x^*) - \sum_{\forall i} \lambda_i^* \nabla gi(x^*) = 0$$
$$\lambda_i^*\,(gi(x^*) - b_i) = 0 \qquad \forall\ i=1,...,m$$
$$\lambda i^* \geq 0 \qquad \forall\ i=1,...,m$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Teorema XI.7: *Condición Suficiente de óptimo global*
Sea $f(x):R^n \rightarrow R^1$ una función cóncava a ser maximizada sobre una región factible convexa (ver Apéndice al final del capítulo), luego todo $x^* \in R^n$ que satisfaga las condiciones necesarias de óptimo de Kuhn-Tucker es un máximo global de PNL.
Sea $f(x):R^n \rightarrow R^1$ una función convexa a ser minimizada sobre una región factible convexa, luego todo $x^* \in E^n$ que satisfaga las condiciones necesarias de óptimo de Kuhn-Tucker es un mínimo global de NLP.

Ejemplo: Dado el NLP:

$$Min\ f(x) = x_1^2 + x_2$$
$$s.a.:\quad x_1^2 + x_2^2 \leq 9$$
$$x_1 + x_2 \leq 1$$

Se resuelve el mismo usando condición necesaria y suficiente de óptimo.

Resolución: Se aplica condición necesaria de óptimo local (Teorema XI.6), para lo cual es necesario primero llevar el NLP a la estructura general en base a la cual se planteó el teorema XI.6, esto requiere en este caso: max -f(x). Luego se obtiene:

$$\nabla f(x) - \lambda_1 \nabla g_1(x) - \lambda_2 \nabla g_2(x) = 0$$
$$\lambda_1 [g_1(x) - 9] = 0$$
$$\lambda_2 [g_2(x) - 1] = 0$$
$$\lambda_1 \geq 0$$
$$\lambda_2 \geq 0$$
$$x_1^2 + x_2^2 \leq 9$$
$$x_1 + x_2 \leq 1$$

Se genera así el siguiente sistema de ecuaciones e inecuaciones:
① $-2\, x_1 - \lambda_1\, 2\, x_1 - \lambda_2 = 0$
② $-1 - 2\, \lambda_1\, x_2 - \lambda_2 = 0$
③ $\lambda_1\, (x_1^2 + x_2^2 - 9) = 0$
④ $\lambda_2\, (x_1 + x_2 - 1) = 0$
⑤ $\lambda_1 \geq 0$
⑥ $\lambda_2 \geq 0$
⑦ $x_1^2 + x_2^2 \leq 9$
⑧ $x_1 + x_2 \leq 1$

Resolviendo el sistema de ecuaciones e inecuaciones se obtienen el punto $(x^*, \lambda^*) = (0; -3; 1/6; 0)$ que verifica las condiciones necesarias de óptimo local.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Se analiza a continuación la condición suficiente de óptimo, Teorema XI.7, obteniendo:

Función objetivo: $f(x) = x_1^2 + x_2$ es una función convexa.

Región factible: las funciones $g_1 = x_1^2 + x_2^2$ y $g_2 = x_1 + x_2$ son convexas y el signo de la restricción correspondiente es de $\leq$, $\Rightarrow$ la región factible es convexa (ver Apéndice de final de capítulo).

Por lo tanto, todo x^* que satisface la condición necesaria de óptimo local Teorema XI.7, es mínimo global.

XI.3.2.2 Algoritmos para Resolver NLP

Son muchos los algoritmos desarrollados para la resolución de NLP. Cada uno de ellos adopta un tipo de NLP (convexo, cuadrático, con restricciones lineales, sin restricciones, etc.) y en función de las características particulares del mismo desarrolla una estrategia de búsqueda del óptimo.

El objetivo de esta sección es dar al lector una idea básica de la estrategia y la estructura de los algoritmos de optimización más convencionales. Siguiendo este propósito se describen a continuación algunos de los algoritmos básicos más difundidos en la bibliografía.

XI.3.2.2.1 Algoritmos para NLP Univariables sin Restricciones

Los problemas de optimización univariables sin restricciones han sido muy estudiados desde la perspectiva de lograr un método de búsqueda del óptimo que fuera lo más eficiente y robusto posible. El resultado ha sido la generación de casi una decena de algoritmos muy eficientes. La importancia asignada a la resolución de problemas de optimización tan pequeños radica en que la mayoría de los algoritmos de resolución de problemas de optimización multivariables realizan en cada iteración optimizaciones univariables, para lo cual requieren de estos algoritmos. Por ejemplo para resolver un problema de 20 variables un algoritmo puede requerir 20 optimizaciones univariables en cada iteración. Si el número de iteraciones requeridas para alcanzar la convergencia fuese 10, el algoritmo requerirá realizar 200 convergencias de un algoritmo de optimización univariable. Resulta entonces evidente la importancia de estos algoritmos.

Métodos de Reducción de Intervalo

Consideremos el problema: min $f(x)$ / $x \in [a,b]$. $[a,b]$ se denomina intervalo de incertidumbre, puesto que el óptimo $x^* \in [a,b]$ pero se desconoce su valor. Es necesario destacar que a y b son valores elegidos arbitrariamente, no son restricciones del problema, de manera tal que si el óptimo cae en uno de los extremos del intervalo, es necesario desplazar el valor del intervalo y resolver nuevamente el problema.

Los algoritmos de búsqueda del óptimo por reducción de intervalo, esencialmente se basan en reducir el intervalo de incertidumbre eliminando porciones del mismo en las cuales se tiene certeza que no se encuentra el óptimo. Los algoritmos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

más conocidos de este grupo son el método de la sección dorada y el método de Fibonacci. A continuación se describe uno de ellos.

Teorema XI.8: Sea $f:R^1 \rightarrow R^1$ estrictamente convexa sobre $[a,b]$. Sean $\lambda,\mu \in [a,b] \,/\, \lambda<\mu$. Luego:

(i) Si $f(\lambda)>f(\mu) \rightarrow f(x_3)>f(\mu) \;\; \forall\, x_3 \in [a,\lambda]$.

(ii) Si $f(\lambda) \leq f(\mu) \rightarrow f(x_3) \geq f(\lambda) \;\; \forall\, x_3 \in [\mu,b]$.

Método de la Sección Dorada: Dado el problema min $f(x) \,/\, x \in [a,b]$ con $f(x)$ estrictamente convexa. Sea $[a_k,b_k]$ el intervalo de incertidumbre asociado a la iteración k, y sean λ_k y $\mu_k \in [a_k,b_k] \,/\, \lambda_k<\mu_k$. Del Teorema XI.8 se tiene:

(i) Si $f(\lambda_k) > f(\mu_k) \Rightarrow (b_{k+1}-a_{k+1}) = (b_k-\lambda_k)$.

(ii) Si $f(\lambda_k) \leq f(\mu_k) \Rightarrow (b_{k+1}-a_{k+1}) = (\mu_k - a_k)$.

Los puntos λ_k y μ_k se definen como:

$$\text{(A)} \quad \lambda_k=a_k+(1-\alpha)(b_k-a_k)$$

$$\text{(B)} \quad \mu_k=a_k+ \alpha(b_k-a_k)$$

Calculando λ_k y μ_k con las ecuaciones (A) y (B), es fácil deducir que los intervalos de incertidumbre de dos iteraciones sucesivas se relacionan a través de la siguiente ecuación: $(b_{k+1}-a_{k+1}) = \alpha(b_k-a_k)$.

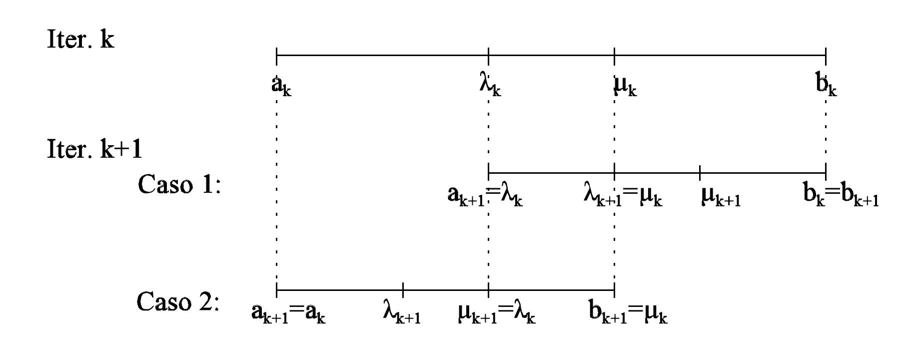
Es fácil mostrar que un valor de $\alpha=0,618$ permite que la longitud del nuevo intervalo de incertidumbre no dependa del resultado de la iteración k (independiente de si resulta (i) o (ii)), y el punto que permanece en el intervalo sirve como uno de los puntos para la nueva iteración. Esto implica que en la primer iteración es necesario calcular dos puntos y en las restantes iteraciones sólo es necesario calcular un punto. Se presentarán dos casos:

***Caso 1**:* Si $f(\lambda_k)>f(\mu_k)$ por el Teorema XI.8 $a_{k+1}=\lambda_k$ y $b_{k+1}=b_k$ y $\lambda_{k+1}=\mu_k$ calculando μ_{k+1} con la ecuación (B).

***Caso 2**:* Si $f(\lambda_k) \leq f(\mu_k)$ por el Teorema XI.8 $a_{k+1}=a_k$ y $b_{k+1}=\mu_k$ y $\mu_{k+1}=\lambda_k$ calculando λ_{k+1} con la ecuación (A).

Representación gráfica:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



ALGORITMO

Etapa Inicial

Elegir la longitud final del intervalo de incertidumbre $l>0$

Sea $[a_1,b_1]$ el intervalo inicial, calcular:

$\lambda_1=a_1+(1-\alpha)(b_1-a_1)$

$\mu_1=a_1+\alpha(b_1-a_1)$ $\qquad\alpha = 0,618$

evaluar $f(\lambda_k) \wedge f(\mu_k)$, hacer k=1 y continuar

Etapa principal

Mientras $(b_k-a_k) \geq l$

Si $f(\lambda_k)>f(\mu_k)$

Hacer $a_{k+1}=\lambda_k$ y $b_{k+1}=b_k$ y $\lambda_{k+1}=\mu_k$ y $\mu_{k+1}=a_{k+1}+\alpha(b_{k+1}-a_{k+1})$

Evaluar $f(\mu_{k+1})$

Si No

Hacer $a_{k+1}=a_k$ y $b_{k+1}=\mu_k$ y $\mu_{k+1}=\lambda_k$ y $\lambda_{k+1}=a_{k+1}+(1-\alpha)(b_{k+1}-a_{k+1})$

Evaluar $f(\lambda_{k+1})$

Fin Si

Hacer k=k+1

Fin Mientras

Ejemplo: Resolución del NLP min $f(x) = 2x^2+16/x$ en el intervalo $1\leq x\leq 5$ usando el algoritmo de la sección dorada, hasta una longitud final del intervalo de incertidumbre $l=0,03$.

Los resultados de las sucesivas iteraciones se muestran en la siguiente tabla:

k	a_k	b_k	λ_k	u_k	$f(\lambda_k)$	$f(u_k)$	b_k-a_k
1	1	5	2.528	3.472	19.1107	28.7179	4
2	1	3.472	1.9443	2.528	15.7898	19.1107	2.472

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

3	1	2.528	1.5831	1.9443	15.1191	15.7898	1.528
4	1	1.9443	1.3607	1.5837	15.4616	15.1191	0.9443
5	1.3607	1.9443	1.5837	1.7214	15.1191	15.2212	0.5836
6	1.3607	1.7214	1.4985	1.5837	15.1684	15.1191	0.3607
7	1.4985	1.7214	1.5837	1.6362	15.1191	15.1331	0.2288
8	1.4985	1.6362	1.5511	1.5837	15.1271	15.1191	0.1377
9	1.5511	1.6362	1.5837	1.6037	15.1191	15.1206	0.0851
10	1.5511	1.6037	1.5712	1.5837	15.1206	15.1191	0.0526
11	1.5712	1.6037	1.5837	1.5913	15.1191	15.1191	0.0325
12	1.5712	1.5913	1.5789	1.5837	15.1195	15.1191	0.02

De la tabla se obtiene que el óptimo pertenece al intervalo [1,5789; 1,5913]. Luego, puede adoptarse como óptimo a cualquier punto de dicho intervalo. En general se elige el punto medio.

Métodos que Utilizan Derivadas

Estos métodos se diferencian de los del grupo anterior porque utilizan la información de la derivada de la función para dirigir la búsqueda.

Generalmente convergen en un menor número de iteraciones. Requieren que la función sea diferenciable, y además es necesario calcular la derivada de la función ya sea en forma analítica o numérica.

En este grupo se pueden incluir el método de Newton, de la bisección, de la secante y búsqueda cúbica como los más convencionales. A continuación se describe el método de Newton.

Método de Newton: Se basa en aproximar a la función f(x) en el punto λ_k, a una función cuadrática q(x), y luego buscar el mínimo de q(x). La aproximación cuadrática se obtiene mediante una expansión de Taylor que incluye el término de segundo orden $q(x)=f(\lambda_k)+f'(\lambda_k)(x-\lambda_k)+½f''(\lambda_k)(x-\lambda_k)^2$. Si λ_k es un punto suficientemente próximo a un óptimo, todo punto x que verifica la condición necesaria de óptimo local no condicionado $q'(x)=0$, verifica también la condición suficiente de óptimo local no condicionado. Luego, λ_{k+1} es elegido como el punto que minimiza la función q(x). Es decir, que verifica $q'(x)=f'(\lambda_k)+f''(\lambda_k)(x-\lambda_k)=0$. De aquí se obtiene (haciendo $\lambda_{k+1}=x$): $\lambda_{k+1}=\lambda_k- f'(\lambda_k)/f''(\lambda_k)$.

El proceso termina cuando $|\lambda_{k+1}-\lambda_k|<\varepsilon$ o $|f'(\lambda_k)|<\varepsilon$ donde ε es un escalar prefijado.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nota: El procedimiento puede ser aplicado a funciones diferenciables dos veces, y además es necesario que $f''(\lambda_k) \neq 0$. Puede demostrarse que este método converge si el punto inicial es suficientemente próximo a un óptimo.

ALGORITMO

Etapa Inicial

Elegir λ_1 y ε. hacer k=1

Calcular $f'(\lambda_k)$ y $f''(\lambda_k)$ y $\lambda_{k+1} = \lambda_k - f'(\lambda_k)/f''(\lambda_k)$ y continuar

Etapa principal

Mientras $(\lambda_{k+1} - \lambda_k) \geq \varepsilon$

Hacer k=k+1

Calcular $f'(\lambda_k)$, $f''(\lambda_k)$ y $\lambda_{k+1} = \lambda_k - f'(\lambda_k)/f''(\lambda_k)$

Fin Mientras

Ejemplo: Se resuelve el NLP min $f(x) = 2x^2 + 16/x$ usando el algoritmo de Newton, con ε=0,03.

Los resultados de la sucesivas iteraciones se muestran en la tabla siguiente.

$$f'(x) = 4x - \frac{16}{x^2} \; ; \qquad f''(x) = 4 + \frac{32}{x^3}$$

k	x_k	$f'(x_k)$	$f''(x_k)$	$f(x_k)$	$x_{(k+1)}$	$x_{(k+1)}-x_k$
1	3.0000	10.2222	5.1852	23.3333	1.0286	1.9714
2	1.0286	-11.0092	33.4067	17.6715	1.3581	0.3295
3	1.3581	-3.242	16.7742	15.47	1.5514	0.1933
4	1.5514	-0.4422	12.5701	15.127	1.5866	0.0352
5	1.5866	-0.0099	12.0125	15.1191	1.5874	0,0008<0,03

De la tabla se adopta el punto x^*=1,5874 como un mínimo local. El valor de la función objetivo en este punto es $f(x^*)$=15,1191.

XI.3.2.2.2 Algoritmos para NLP sin Restricciones Multivariables

Los problemas de optimización multivariables sin restricciones son muy comunes en todas las áreas del conocimiento, de allí el gran esfuerzo que se ha invertido en desarrollar algoritmos eficientes para resolver los mismos. Se puede

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

rescatar de la bibliografía cerca de una veintena de algoritmos extensamente usados, no obstante es mucho mayor la lista de algoritmos que por determinadas circunstancias no fueron muy difundidos.

En su mayoría, estos algoritmos fueron desarrollados a partir de razonamiento heurístico y posteriormente justificados matemáticamente, cuando era posible. Una característica de estos algoritmos es que sólo convergen a óptimos locales.

En los últimos años se han desarrollado algunas estrategias que intentan encontrar óptimos globales. Esta es un área aún en desarrollo.

En lo que sigue, se describen algunos de los algoritmos clásicos, que constituyeron la base de la mayoría de los algoritmos desarrollados posteriormente.

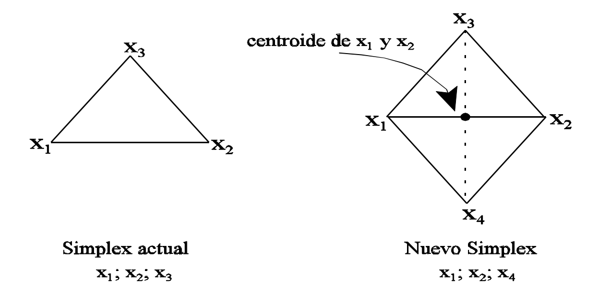
Método de Búsqueda Simplex: Este método, es una de las más antiguas y elementales estrategias de búsqueda del óptimo de una función multivariable sin restricciones. Se lo conoce con el mismo nombre del método para resolver LP descripto en secciones anteriores, pero su estrategia no guarda relación alguna.

Dado el problema min $f(x)$ / $x \in R^n$, el método consiste en:

Seleccionar n+1 puntos equidistantes, los cuales corresponderían a los vértices de un poliedro regular que se denomina simplex. Por ejemplo, si n=2 el simplex es un triángulo equilátero, si n=3 el simplex es un tetraedro, etc.

Generar un nuevo Simplex seleccionando el vértice con el peor valor de la función objetivo y proyectándolo una distancia determinada a través del punto equidistante de todos los restantes vértices denominado ce*ntroide*.

En el gráfico de la figura siguiente se representa en forma esquemática el procedimiento para el caso de un problema de dos variables:



El procedimiento en su evolución utiliza las siguientes reglas:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Regla 1: Si el peor vértice fue generado en la iteración anterior, elija el vértice con el siguiente peor valor de la función objetivo.
Regla 2: Si un dado vértice se mantiene inalterado durante M iteraciones, reducir el tamaño del simplex por algún factor. Iniciar un nuevo simplex manteniendo el mejor punto.
Regla 3: Criterio de terminación. La búsqueda es concluida cuando el simplex es suficientemente pequeño, o cuando la desviación estandar del valor de la función objetivo en cada vértice se torna suficientemente pequeña.

Métodos de Búsqueda Directa

Estos algoritmos se basan en la siguiente **estrategia**:

- *dado un punto x,*
- *determinar una dirección d de búsqueda,*
- *búsqueda lineal: luego, f(x) es minimizada desde x en la dirección d. Para ello se requiere resolver el siguiente problema de optimización univariable:*

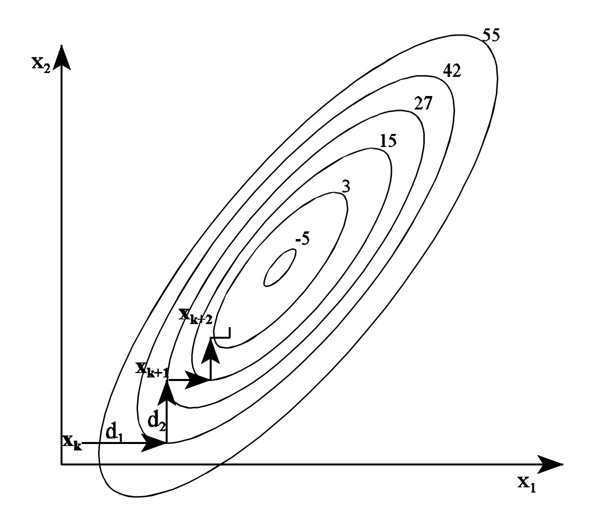
$$\min_{\lambda} f(x+\lambda d) \text{ s.a:}\{\lambda\in [a,b], \lambda\in R^1 \}$$

Este subproblema se resuelve mediante alguno de los algoritmos para problemas de optimización univariable descriptos en la sección anterior. Esta estrategia es la base de muchos algoritmos. La diferencia entre ellos sólo radica en el método que usan para determinar la dirección de búsqueda. A continuación se describen dos de los algoritmos más simples a efectos de mostrar la arquitectura de los mismos.

Método Coordenado Cíclico: Utiliza los ejes coordenados como direcciones de búsqueda. Es decir, utiliza las direcciones $d_1,d_2,...,d_n$ donde d_j tiene un 1 en la posición j y ceros en todo el resto. Por lo tanto, cuando se optimiza desde el punto x^0 en la dirección d_j, el nuevo punto será $x^1=x^0+\lambda_j d_j = (x_1^1=x_1^0;\dots; x_j^1 = x_j^0+\lambda_j;... ;x_n^1 = x_n^0)$.

Representación Esquemática

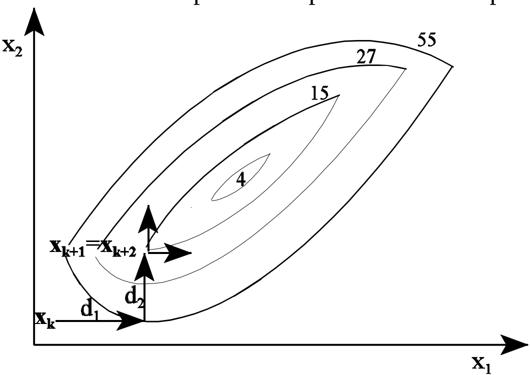
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



Una iteración se inicia en x_k y termina en x_{k+1} luego de haber optimizado (búsqueda lineal) en todas las direcciones. Es decir $x_{k+1}=x_k+\sum_{\forall j} \lambda_j d_j$ donde λ_j es el óptimo de $\min_\lambda f(x_j+\lambda d_j)$.

El *criterio de terminación* es $\|x_{k+1}- x_k\| < \varepsilon$, donde $\|.\|$ es la norma Euclídea.

Etapa de aceleración: Este método converge a un punto con gradiente cero (óptimo local) cuando se aplica a una función diferenciable. En ausencia de diferenciabilidad, el método puede detenerse en un punto no óptimo. Esto se representa en la figura:



En el punto x_{k+1} la función alcanza el valor mínimo según ambas direcciones $d_1=(1,0)$ y $d_2=(0,1)$ por lo tanto allí se detiene sin ser este punto el óptimo. Para salvar este problema, se propone una optimización univariable desde x_k en la dirección $(x_{k+1}- x_k)$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

La búsqueda a lo largo de la dirección (x_{k+1}-x_k) suele usarse frecuentemente en el método coordenado cíclico, aún cuando f(x) es diferenciable, para acelerar la convergencia del método. De allí que se la denomina *etapa de aceleración*. Usualmente cada *p* iteraciones se aplica una etapa de aceleración. El parámetro *p* es determinado en base a criterios prácticos.

ALGORITMO

Etapa Inicial

Elegir ε>0 y p$\geq$1 (entero). Hacer dj=e_j $\forall$j=1,..,n. Elegir x_1. Hacer y_1=x_1 y k=j=i=1
Mientras j$\leq$n
  Calcular λ_j solución óptima de $\min_\lambda f(x_j+\lambda d_j)$ / $\lambda \in R^1$
  Hacer $y_{j+1}=y_j+\lambda_j d_j$
  Hacer j=j+1
Fin Mientras
  Hacer $x_{k+1}= y_{n+1}$

Etapa principal

Mientras $\|x_{k+1}- x_k\| \geq \varepsilon$
  Mientras i$\leq$p
    Hacer j=1
    Hacer $y_1 = x_{k+1}$
    Hacer k=k+1
    Mientras j$\leq$n
      Calcular λ_j solución óptima de $\min_\lambda f(y_j+\lambda d_j)$ / $\lambda \in R^1$
      Hacer $y_{j+1}=y_j+\lambda_j d_j$
      Hacer j=j+1
    Fin Mientras
    Hacer $x_{k+1}= y_{n+1}$
    Hacer i= i+1
  Fin Mientras
  Hacer d=x_{k+1}-x_k
  Calcular λ^* solución óptima de $\min_\lambda f(x_{k+1}+\lambda d)$ / $\lambda \in R^1$
  Hacer k=k+1
  Hacer $x_{k+1}= x_k+\lambda^* d$
  Hacer i=1
Fin Mientras

Ejemplo: Resolución del NLP min $f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^2- 4x_1x_2 + x_1$ utilizando el método coordenado cíclico desde el punto inicial x_0=(0;-1). Adoptar ε = 0,03.

Previo a iniciar el proceso iterativo es necesario realizar algunas consideraciones:

Las direcciones de búsqueda para este problema definido en R^2 son: d_1= (1; 0) y d_2= (0; 1).

Sea λ^* el valor que minimiza f(x+λd). Dicho valor se obtiene resolviendo el problema univariable $\min_\lambda f(x+\lambda d)$ s.a:{$\lambda \in [a,b]$, $\lambda \in R^1$ }utilizando para esto algún algoritmo de búsqueda univariable tal como el método de la sección dorada visto anteriormente.

No obstante, desde un punto de vista académico práctico, es más fácil resolver el problema $\min_\lambda f(x+\lambda d)$ s.a:{$\lambda \in [a,b]$, $\lambda \in R^1$ } en forma analítica utilizando elementos teóricos. Debe quedar claro que éste es sólo un recurso académico.

Luego, para calcular el valor de λ^* en cada una de las sucesivas búsquedas lineales se puede formular una ecuación en forma genérica asociada a la función a optimizar:

Sea el punto inicial y = (a; b) y la dirección de búsqueda d = (c; g) . Luego:

$$\min\ f(y+\lambda d) = f\left[a+\lambda c;\ b+\lambda g\right] = 4(a+\lambda c)^2 + 3(b+\lambda g)^2 - 4(a+\lambda c)(b+\lambda g) + (a+\lambda c)$$

Se obtiene así una función en λ a ser minimizada. Luego, si λ^* minimiza f(y +λd) debe verificar la condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado:

$$\frac{df}{d\lambda} = 0 = 8c(a+\lambda^* c) + 6g(b+\lambda^* g) - 4c(b+\lambda^* g) - 4g(a+\lambda^* c) + c$$

$$\lambda^* = \frac{4c(b-2a) + 2g(2a-3b) - c}{8c^2 + 6g^2 - 8cg}$$

La ecuación anterior es aplicable a cualquier dirección de búsqueda. Para el caso particular de la dirección de búsqueda d_1= (1; 0), es c = 0 y g = 1, luego λ_1^* vendrá dado por:

$$\lambda_1^* = \frac{4(b-2a) - 1}{8}$$

Mientras que para la dirección de búsqueda d_2=(0; 1), es c = 1 y g = 0, luego λ_2^*

$$\lambda_2^* = \frac{4a - 6b}{6}$$

Con las ecuaciones generadas se calculará el valor de λ_1^* y λ_2^* de cada búsqueda lineal. Se inicia entonces la aplicación del algoritmo:

Iteración 1:

$$y_1^{(1)} = x_0 = [0; -1] \qquad y_2^{(1)} = y_1^{(1)} + \lambda_1^* d_1 = \left[0 + \lambda_1^*; -1\right]$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Iteración 2:

$$y_1^{(2)} = x_1 = \left[-0{,}625;\ -0{,}4167\right]$$

$$\lambda_1^* = \frac{4(-1-0)-1}{8} = -0{,}625 \quad \Rightarrow \quad y_2^{(1)} = \left[-0{,}625\,;\ -1\right]$$

$$y_2^{(2)} = \left[-0{,}625 + \lambda_1^*;\ -0{,}4167\right] = \left[-0{,}33335\,;\ -0{,}4167\right] \quad (\lambda_1^* = 0{,}29165)$$

$$y_3^{(1)} = \left[-0{,}625;\ -1 + \lambda_2^*\right] \qquad \lambda_2^* = \frac{(-4)\,0{,}625 + 6}{6} = 0{,}5833$$

$$y_3^{(2)} = \left[-0.33335;\ -0.4167 + \lambda_2^*\right] = \left[-0.33335;\ -0.2222\right] = x_2 \quad (\lambda_2^* = 0{,}19446)$$

$$\Rightarrow \quad y_3^{(1)} = x_1 = \left[-0{,}625;\ -0{,}4167\right]$$

$$\|x_2 - x_1\| = 0{,}3506 > 0{,}03$$

$$\|x_0 - x_1\| = \sqrt{(0{,}625)^2 + (-1 + 0{,}4167)^2} = 0{,}8549 > 0{,}03$$

Los resultados de las 4 primeras iteraciones se presentan en la tabla siguiente:

Iteración i	$x_{i-1} = y_1^i$	λ_1^*	y_2^i	λ_2^*	$y_3^i = x_i$	$f(x_i)$	$\|x_{i-1} - x_i\|$
1	$\begin{pmatrix} 0{,}0000 \\ -1{,}0000 \end{pmatrix}$	-0.625	$\begin{pmatrix} -0{,}6250 \\ -1{,}0000 \end{pmatrix}$	0.5833	$\begin{pmatrix} -0{,}6250 \\ -0{,}4167 \end{pmatrix}$	0.4167	0.8549
2	$\begin{pmatrix} -0{,}6250 \\ -0{,}4167 \end{pmatrix}$	0.2916	$\begin{pmatrix} -0{,}3334 \\ -0{,}4167 \end{pmatrix}$	0.1946	$\begin{pmatrix} -0{,}3334 \\ -0{,}2222 \end{pmatrix}$	-0.037	0.3506
3	$\begin{pmatrix} -0{,}3334 \\ -0{,}2222 \end{pmatrix}$	0.0972	$\begin{pmatrix} -0{,}2361 \\ -0{,}2222 \end{pmatrix}$	0.0648	$\begin{pmatrix} -0{,}2361 \\ -0{,}1574 \end{pmatrix}$	-0.0874	0.1168
4	$\begin{pmatrix} -0{,}2361 \\ -0{,}1574 \end{pmatrix}$	0.0324	$\begin{pmatrix} -0{,}2037 \\ -0{,}1574 \end{pmatrix}$	0.0216	$\begin{pmatrix} -0{,}2037 \\ -0{,}1358 \end{pmatrix}$	-0.0931	0.039

Luego de cuatro iteraciones (p=4) se decide aplicar una etapa de aceleración.
La dirección de búsqueda para la aceleración es:

$$d = x^4 - x^3 = \left[0{,}0324;\ 0{,}0216\right]$$

$$x^5 = x^4 + \lambda^* d = \left[-0{,}2037 + \lambda^*\,0{,}0324;\ -0{,}1358 + \lambda^*\,0{,}0216\right] \quad (\lambda * = 0{,}5)$$

$$x^5 = \left[-0{,}1875;\ -0{,}1250\right] \qquad \|x^4 - x^5\| = 0{,}019 < 0{,}03$$

Solución: $x^* = \left[-0{,}1875;\ -0{,}125\right]$ $\qquad f(x^*) = -0{,}09375$

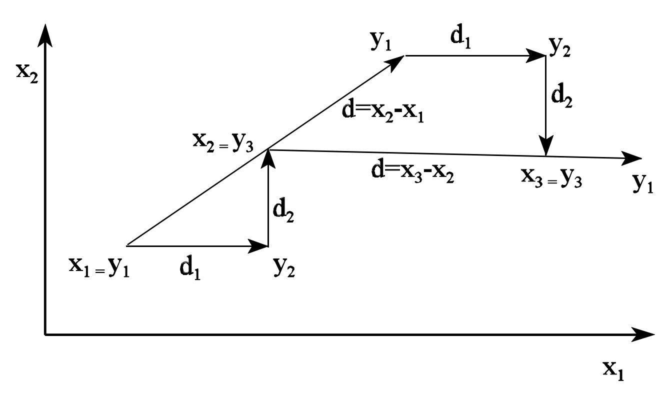
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Método de Hooke & Jeeves *(Modificado).* Este método se basa en realizar la búsqueda del óptimo según dos tipos de estrategias:

Búsqueda exploratoria: en la iteración k, partiendo del punto y_k genera el punto x_{k+1} mediante una búsqueda siguiendo las direcciones de los ejes coordenados, luego pasa a la etapa de búsqueda pautada.

Búsqueda pautada: generado el punto x_{k+1} mediante la etapa exploratoria, realiza una búsqueda a lo largo de la dirección $d=(x_{k+1}- x_k)$ generando el punto y_{k+1}, luego vuelve a la etapa de búsqueda exploratoria.

Gráfico:



Nota: El método de Hooke and Jeeves original, propone realizar las búsquedas a lo largo de los ejes coordenados y de la dirección $d=(x_{k+1}- x_k)$ a través de saltos discretos y evaluaciones de la función. La magnitud del salto se va ajustando a medida que avanza el cálculo. Es decir, en su versión original el método no propone realizar optimizaciones univariables según las distintas direcciones.

Ejemplo: Resolución del NLP min $f(x) = 4x_1^2 + 3x_2^2- 4x_1x_2 + x_1$ utilizando el método de Hooke & Jeeves desde el punto inicial x_1=(0;-1).Adoptar ε = 0,03.
Se define $y_1= x_1$= (0; -1).

Iteración 1:

Búsqueda exploratoria: en las dirección d_1=(1; 0) y d_2=(0; 1) desde x_1=(0;-1). Esta búsqueda es la misma que se realizó en la iteración 1 del método anterior, por lo tanto se utilizan aquí dichos resultados: x_2= (-0,625; -0,4167)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Búsqueda pautada: en la dirección $(x_2 - x_1) = (-0,625; 0,583)$

$$mín f\,[x_2 + \lambda(x_2 - x_1)] = \min f\left[(-0,625;\ -0,417) + \lambda(-0,625; 0,583)\right] =$$

$$\min f(-0,625 - 0,625\lambda;\ -0,417 + 0,583\lambda)$$

Luego, para realizar la búsqueda univariable y obtener el valor de λ^* puede utilizarse la ecuación desarrollada en el ejemplo anterior, o bien plantear y resolver el problema univariable correspondiente. Aquí se usa la segunda posibilidad simplemente a modo de muestra. Luego, se reemplazan los valores de las componentes del nuevo punto en la función objetivo original obteniéndose una función en λ:

$$\min\ F(\lambda) = 4\,(-0,625 - 0,625\lambda)^2 + 3\,(-0,417 + 0,583\lambda)^2 - 4\,(-0,625 - 0,625\lambda)$$

$$(-0,417 + 0,583\lambda) - 0,625 - 0,625\lambda$$

Si λ^* es un mínimo local no condicionado de $F(\lambda)$ debe verificar la condición necesaria de óptimo:

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = 3,125 + 3,124\lambda - 1,458 + 2,038\lambda - 1,042 + 1,457 + 2,914\lambda - 0,625 = 0$$

$$1,457 + 8,076\lambda = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_3^* = -0,180$$

Luego, el nuevo punto será:

$$y_1 = x_2 + \lambda_3^*(x_2 - x_1) = [-0,625;\ -0,417] + (-0,180)[-0,625; 0,583]$$

$$y_1 = [-0,512;\ -0,521]$$

Iteración 2:

Búsqueda exploratoria, en las direcciones $d_1=(1;\ 0)$ y $d_2=(0;\ 1)$ desde el punto generado en la iteración anterior $y_1=(-0,512;\ -0,521)$. Esto es:
Búsqueda univariable según d_1:

$$\min f(y_1 + \lambda d_1) = \min f\left[(-0,512;\ -0,521) + \lambda(1; 0)\right] = \min f(-0,512 + \lambda;\ -0,521)$$

Reemplazando en la función objetivo y aplicando condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado se obtiene λ_1^*:

$$F(\lambda) = 1,048 - 4,096\lambda + 4\lambda^2 + 0,814 - 1,067 + 2,084\lambda - 0,512 + \lambda$$

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = 8\lambda - 1,012 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_1^* = 0,126$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_2 = y_1 + \lambda_1^* d_1 = (-0{,}512;\ -0{,}521) + 0{,}126(1;0) = (-0{,}386;\ -0{,}521)$$

Búsqueda univariable según d_2:

$$Min f(y_2 + \lambda d_2) = Min f\left[(-0{,}386;\ -0{,}521) + \lambda_2(0;1)\right] = (-0{,}386;\ -0{,}521 + \lambda)$$

Reemplazando en la función objetivo y aplicando condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado se obtiene λ_2^*:

$$F(\lambda) = 4(-0{,}386)^2 + 3(-0{,}521 + \lambda)^2 - 4(-0{,}386)(-0{,}521 + \lambda) - 0{,}386$$

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = 6\lambda - 1{,}582 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_2^* = 0{,}263$$

$$y_3 = x_3 = (y_2 + \lambda_2^* d_2) = (-0{,}386;\ -0{,}521) + 0{,}263(0;1) = (-0{,}386;\ -0{,}258)$$

Luego se verifica convergencia:

$$\|x_3 - x_2\| = 0{,}4642 > \varepsilon$$

Dado que no verifica convergencia se pasa a:

Búsqueda pautada en la dirección (x_3 - x_2)

$$\min\ f(x_3 + \lambda(x_3 - x_2)) = \min f(-0{,}386 + 0{,}239\lambda;\ -0{,}258 + 0{,}159\lambda)$$

Reemplazando en la función objetivo y aplicando condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado se obtiene λ_3^*:

$$F(\lambda) = 4(-0{,}386 + 0{,}239\lambda)^2 + 3(-0{,}258 + 0{,}159\lambda)^2 -$$

$$- 4(-0{,}386 + 0{,}239\lambda)(-0{,}258 + 0{,}159\lambda) - 0{,}386 + 0{,}239\lambda$$

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = 0{,}302\lambda - 0{,}207 = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \lambda_3^* = 0{,}685$$

$$y_1 = [x_3 + \lambda_3^*(x_3 - x_2)] = (-0{,}386;\ -0{,}258) + 0{,}685(0{,}239;0{,}159)$$

$$y_1 = (-0{,}222:\ -0{,}149)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Iteración 3: a partir del punto generado en la iteración 2 y_1= (-0,222; -0,149) se vuelve a aplicar el algoritmo hasta verificar la condición de convergencia.

Métodos que Usan Derivadas

Método de la Dirección de Descenso más Empinada o de Cauchy: Requiere que la función sea diferenciable. Utiliza como dirección de búsqueda la dirección del gradiente de la función. Para un problema de minimización será: $d = -\nabla f(x)$ por lo tanto $x_{k+1} = x_k - \lambda \nabla f(x_k)$.
Inconvenientes del método (Zigzagging): Este método generalmente opera bien durante las primeras iteraciones, produciendo rápidas aproximaciones al óptimo, pero presenta dificultades en las proximidades del óptimo. Este fenómeno se puede corregir produciendo una desviación del gradiente. Es decir, en lugar de utilizar la dirección de desplazamiento $d = -\nabla f(x)$, se puede utilizar la dirección $d = -D\nabla f(x)$ o bien la dirección $d = -\nabla f(x) + g$ donde D y g son una matriz y un vector apropiados. Este procedimiento de corrección se analiza en detalle en los algoritmos posteriores.

Método de Newton *(multivariables)*: Requiere que la función sea contínua y diferenciable dos veces. Se basa en aproximar a la función f(x) en el punto x_k a una función cuadrática q(x) y luego buscar el mínimo de esta nueva función. La aproximación cuadrática se obtiene mediante una expansión de Taylor de segundo orden $q(x)=f(x_k)+\nabla^T f(x_k)(x- x_k)+½(x-x_k)^T H(x_k)(x-x_k)$ donde $H(x_k)$ es la matriz Hessiana de f(x) en x_k. Si x_k es un punto suficientemente próximo a un óptimo, todo punto x que verifica la condición necesaria de óptimo local no condicionado $\nabla q(x)=0$, también verifica la condición suficiente de óptimo local no condicionado. Luego, x_{k+1} es elegido como el punto que minimiza la función q(x). Es decir $\nabla q(x)=\nabla f(x_k)+H(\lambda_k)(x-x_k)=0$. Asumiendo que $H(x_k)^{-1}$ $\exists$, (premultiplicando ambos miembros de la ecuación anterior por $H(x_k)^{-1}$ y reordenando) se tiene: $x_{k+1} = x_k - H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$.

En esta ecuación recursiva, se ha definido al punto x que optimiza la función cuadrática q(x) como el punto x_{k+1}. De esta manera la ecuación permite calcular en forma recursiva, los puntos generados por el método de Newton, a partir de un punto inicial dado. De la ecuación de generación del nuevo punto se deriva como dirección de búsqueda $d = -H(x_k)^{-1}\nabla f(x_k)$. El procedimiento termina cuando $\|x_{k+1}- x_k\| < \varepsilon$ o $\|\nabla f(x_k)\| < \varepsilon$, donde ε es un escalar especificado previamente.

Análisis del método: Si x^* es un mínimo local estricto de f(x) ($\nabla f(x^*)=0$). Luego, asumiendo que f(x)) es continua y diferenciable dos veces, $H(x_k)$ será positiva definida para x_k suficientemente próximo a x^*, lo cual implica que $H(x_k)^{-1}$ $\exists$ y por lo tanto el punto x_{k+1} podrá ser calculado mediante la ecuación recursiva definida.

Convergencia: Los puntos generados por el método de Newton pueden no converger.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

La razón de que esto ocurra es que $H(x_k)$ puede ser singular, lo cual implica que $H(x_k)^{-1}$ no existe, o bien, aún si $H(x_k)^{-1}$ $\exists$, $f(x_{k+1})$ puede no ser necesariamente mejor que $f(x_k)$.
Puede demostrarse que el método converge si x_k es suficientemente próximo a un óptimo.

Conclusión respecto a los métodos que usan derivadas. El método de Cauchy tiene buena performance en las primeras iteraciones (lejos del óptimo) pero se torna ineficiente a medida que se aproxima al óptimo. En contraposición a éste, el método de Newton asegura convergencia en las proximidades del óptimo. Como consecuencia de las ventajas y desventajas de estas estrategias, se han desarrollado algoritmos que intentan *aprovechar* las ventajas de ambas. Algunos de ellos se describen a continuación.

Métodos que Usan Direcciones Conjugadas

Algunos de estos métodos utilizan derivadas, y otros evaluaciones de la función. Son, al igual que los anteriores, métodos de búsqueda directa cuya diferencia radica en que usan direcciones conjugadas.

Los distintos algoritmos de optimización que utilizan direcciones conjugadas, se diferencian entre si en la estrategia de generación de las direcciones conjugadas. Los más conocidos son el método de Davidon Fletcher and Powel, el método de Zangwill, y el método de Fletcher and Reeves entre otros. A modo de ejemplo, a continuación se describe el primero de estos algoritmos, luego de algunas definiciones necesarias.

Vectores Conjugados: Sea H una matriz (nxn) simétrica. Los vectores $d_1,...,d_k$ son llamados H-conjugados o conjugados si ellos son l.i. y si $d_i^T H d_j = 0 \ \ \forall \ i \neq j$.

Teorema XI.9: Sea $f(x)=c^T x+½x^T Hx$, donde H es una matriz (nxn) simétrica. Sean $d_1,...,d_n$ direcciones H-conjudagas y sea x_1 un punto inicial arbitrario. Para k=1,...,n sea λ_k una solución óptima para el problema que implica: min $f(x_k+\lambda d_k)$, $\lambda \in E'$, $\wedge$ $x_{k+1}= x_k+ \lambda_k d_k$. Luego, para k=1,...,n se debe tener que x_{k+1} es una solución óptima del problema: min f(x) sa:$\{(x-x_1)\in L(d_1,...,d_k)\}$ donde $L(d_1,..,d_k) =\sum_{j=1,...k} \mu_j d_j \ / \ \mu_j \in R^1 \ \forall j$ es el subespacio lineal formado por $d_1,..,d_k$.

En particular, x_{n+1} es un mínimo del problema: min f(x) $x \in R^n$.

Este teorema asegura que optimizando una función cuadrática según un conjunto de direcciones conjugadas es posible alcanzar el óptimo en una sola iteración.

Método de Davidon, Fletcher & Powell (D.F.P): Requiere que la función sea diferenciable.

Dirección de búsqueda: $d_j = -D_j\nabla f(y_j)$ donde D_j es una matriz (nxn) positiva definida y simétrica. Para la siguiente etapa, la matriz D_{j+1} se obtiene de:

$$D_{j+1}=D_j+p_jq_j^T/p_j^Tq_j-D_jp_jq_j^TD_j/p_j^TD_jq_j$$

$$\text{donde:} \quad p_j=\lambda_jd_j \quad q_j=\nabla f(y_{j+1})-\nabla f(y_j) \quad \wedge \quad y_{j+1}=y_j+\lambda_jd_j.$$

Puede verse que este método utiliza como dirección de búsqueda la dirección del gradiente *modificado* por la matriz D_j.

Teorema XI.10: Considere el problema de minimizar $f(x)=c^Tx+½x^THx$ sujeto a $x\in R^n$, donde H es una matriz (nxn) simétrica y positiva definida. Suponga que el problema es resuelto utilizando el método (D.F.P.) comenzando con un punto inicial y_1 $\wedge$ una matriz simétrica (+)definida D_1. En particular, $\forall j=1,...,n$ sea λ_j la solución óptima del problema: min $f(y_j+\lambda d_j)$ sujeto a $\lambda\geq 0$ $\wedge$ sea $y_{j+1}= y_j+\lambda_jd_j$ donde $d_j= -D_j\nabla f(y_j)$ $\wedge$ $D_{j+1}=D_j+p_jq_j^T/p_j^Tq_j-D_jp_jq_j^TD_j /p_j^TD_jq_j$ donde $p_j=\lambda_jd_j$ $q_j=\nabla f(y_{j+1})-\nabla f(y_j)$. Si $\nabla f(y_j)\neq 0$ $\forall j=1,...,n$ luego las direcciones $d_1,...,d_n$ son H-conjugadas y $D_{n+1}=H^{-1}$. Además y_{n+1} es una solución óptima del problema.

Conclusiones del teorema XI.10 respecto del Método de (D.F.P.): Si la matriz inicialmente propuesta es D_1=I, luego $d_1= -\nabla f(y_1)$ con lo cual la primer búsqueda es una *búsqueda de Cauchy*, con lo cual el método estaría aprovechando en las primeras búsquedas las ventajas del método de Cauchy, esto es: rápida aproximación al óptimo.

Por otra parte, la matriz $D_{n+1}=H^{-1}$, lo cual indica que la etapa final es equivalente a la del método de Newton, con lo cual estaría aprovechando las propiedades de convergencia de éste en las proximidades del óptimo. Por esta razón se lo denomina *casi newtoniano*.

Si la f(x) es cuadrática, el método de (D.F.P.) genera direcciones conjugadas, por lo tanto, del Teorema XI.9 se tiene que el método convergerá en una iteración.

ALGORITMO

Etapa Inicial

Elegir $\varepsilon>0$, x_1 y una matriz inicial D_1 positiva definida y simétrica.
Hacer $y_1=x_1$ y k=j=1

Etapa principal

Mientras $\|\nabla f(y_j)\|\geq \varepsilon$ y $j\leq n$
- Hacer $d_j= -D_j\nabla f(y_j)$
- Calcular λ_j solución óptima de $\min_\lambda f(x_j+\lambda d_j)$ / $\lambda\in E^1$
- Hacer $y_{j+1}=y_j+\lambda_jd_j$
- Hacer $p_j=\lambda_jd_j$ $q_j=\nabla f(y_{j+1})-\nabla f(y_j)$
- Hacer $D_{j+1}=D_j + p_jq_j^T/ p_j^Tq_j - D_j p_jq_j^TD_j / p_j^T D_j q_j$
- Hacer j=j+1

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Fin Mientras

Ejemplo: Resolución aplicando el método DFP desde el punto x=(-1; -1) del siguiente NLP no condicionado:

$$\min\ F(x) = 1/2\, x^T A x \qquad A = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \min\ F(x_1;x_2) = \frac{3}{2}x_1^2 + \frac{x_2^2}{2} - x_2 x_1$$

Iteración 1:

$$k{=}1 \qquad y_1 = x_1 = (-1;-1) \qquad D_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$d_1 = -\nabla f(y_1) = -\left[3x_1 - x_2;\, x_2 - x_1\right]^T_{(-1,-1)} \qquad \Rightarrow \qquad d_1 = (2\,;0)^T$$

Búsqueda univariable:

$$\min f(y_1 + \lambda d_1) = \min f\left[(-1;-1) + \lambda(2;0)\right] = \min f\left[-1+2\lambda;\, -1\right]$$

Reemplazando en f(x) se tiene:

$$\min F(\lambda) = \frac{3}{2}(-1+2\lambda)^2 + \frac{(-1)^2}{2} + (-1+2\lambda)\,.(1)$$

Aplicando condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado:

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = 6(-1+2\lambda) + 2 = -6 + 12\lambda + 2 = 12\lambda - 4 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1^* = 1/3$$

$$y_2 = y_1 + \lambda_1^* d_1 = (-1;-1) + 1/3(2;0) = (-0{,}333;-1)$$

Se actualiza la matriz D:

$$D_2 = D_1 + \frac{P_1 P_1^T}{P_1^T q_1} - \frac{D_1 q_1 q_1^T D_1}{q_1^T D_1 q_1} \qquad P_1 = \lambda_1 d_1 \qquad q_1 = \nabla f(y_2) - \nabla f(y_1)$$

$$D_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \frac{\begin{pmatrix} 2/3 \\ 0 \end{pmatrix}(2/3;0)}{(2/3;0)\begin{pmatrix} 2{,}001 \\ -0{,}667 \end{pmatrix}} - \frac{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} 2{,}001 \\ -0{,}667 \end{pmatrix}(2{,}001;-0{,}667)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}{(2{,}001;-0{,}667)\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} 2{,}001 \\ -0{,}667 \end{pmatrix}}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$D_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0{,}3331 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0{,}900 & -0{,}299 \\ -0{,}299 & 0{,}099 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}4331 & 0{,}299 \\ 0{,}299 & 0{,}901 \end{bmatrix}$$

Luego, la segunda dirección de búsqueda viene dada por:

$$d_2 = -D_2 \nabla f(y_2) = -\begin{bmatrix} 0{,}4331 & 0{,}299 \\ 0{,}299 & 0{,}901 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 1.10^{-3} \\ -0{,}667 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0{,}199 \\ 0{,}600 \end{pmatrix}$$

Búsqueda univariable en la dirección d_2:

$$\min f\,(y_2 + \lambda d_2) = \min f \left[\begin{pmatrix} -0{,}333 \\ -1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 0{,}199 \\ 0{,}600 \end{pmatrix} \right] = \min f \begin{bmatrix} -0{,}333 + 0{,}20\lambda \\ -1 + 0{,}60\lambda \end{bmatrix}$$

Reemplazando en f(x) se tiene:

$$F(\lambda) = 3/2\,(-0{,}333 + 0{,}20\lambda)^2 + 1/2\,(-1 + 0{,}60\lambda)^2 - [(-0{,}333 + 0{,}20\lambda)(-1 + 0{,}60\lambda)]$$

Aplicando condición necesaria y suficiente de óptimo local no condicionado:

$$\frac{dF(\lambda)}{d\lambda} = -0{,}2 + 0{,}12\lambda - 0{,}6 + 0{,}36\lambda - 0{,}333 + 0{,}4\lambda - 0{,}12\lambda^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda^* = 1{,}6658$$

Luego, el nuevo punto será:

$$y_3 = y_2 + \lambda_2 d_2 = (-0{,}333; 1) + 1{,}6658(0{,}2; 0{,}6) = (0; 0)$$

Se evalua la condición necesaria de óptimo local no condicionado en y_3:

$$\nabla f(y_3) = (0; 0)^T \quad \Rightarrow \quad x_2 = y_3 = (0; 0) \quad \textit{es mínimo de } f(x)$$

Dado que f(x) es convexa, y_3 verifica también la condición suficiente de óptimo local no condicionado. Por lo tanto, el óptimo fue alcanzado en una sola iteración.

Las propiedades de este algoritmo son derivadas bajo la hipótesis de función cuadrática. Cuando la función no es cuadrática, puede aproximarse la misma a una función cuadrática y ser resuelta con este algoritmo, o bien, puede optimizarse la función original, en cuyo caso el número de iteraciones requerido será superior al indicado para funciones cuadráticas. En este caso el algoritmo no tiene ventajas

comparativas con los anteriores.

XI.3.2.2.3 Algoritmos para NLP con Restricciones

En esta sección se describen algunos de los algoritmos desarrollados para resolver programas matemáticos no lineales con restricciones. Se han utilizado muchas estrategias como base de métodos para buscar el óptimo de este tipo de problemas de optimización. Los más conocidos son los métodos de penalización y barreras, los métodos de planos de corte y dual y los métodos de direcciones factibles. De estas tres estrategias, los métodos de direcciones factibles han dado origen a algoritmos muy difundidos y utilizados en la resolución de este tipo de problemas. La mayoría de los softwares comerciales incorporan estos algoritmos. En lo que sigue se presenta la estrategia de direcciones factibles y dos de los algoritmos más representativos.

Métodos de Direcciones Factibles y de Mejora

Dado el NLP min f(x) sa: $x \in S$. Estos algoritmos resuelven este tipo de NLP desplazándose desde un punto factible (que pertenece a la región factible) a otro punto factible *no inferior* a través de la siguiente estrategia:

Estrategia:

Dado un punto x_k *factible,*

(i) Determinar una dirección d_k tal que para $\delta>0$ y suficientemente pequeño, las siguientes dos propiedades se cumplan:

$x_k+\lambda d_k$ es factible $\forall\, \lambda \in (0, \delta)$
$f(x_k+\lambda d_k) < f(x_k)\ \forall\, \lambda \in (0, \delta)$ (para problemas de minimización)

(ii) Resolver el problema: min $f(x_k+\lambda d_k)$ s.a:$\lambda \in (0,\delta)$ / $x_{K+1}=(x_k+\lambda_k d_k) \in S$

Dirección de Mejora, Factible: Sea $f:R^n \rightarrow R^1$ y sea S un conjunto no vacío en R^n, considere el problema siguiente: min f(x) sa: $x \in S$. Un vector $d \neq 0$ define una *dirección factible* en $x \in S$, si $\exists$ un $\delta>0$ / $(x+\lambda d) \in S\ \ \forall\, \lambda \in (0,\delta)$. Además, d es una *dirección factible y de mejora* en S si $\exists\ \delta>0$ / $f(x+\lambda d)<f(x)\ \wedge\ (x+\lambda d) \in S\ \ \forall\, \lambda \in (0,\delta)$.

Teorema XI.11: (*Caso de Restricciones Lineales*:) Sea $x \in R^n$ una solución factible del problema: min f(x) s.a:{$Ax \leq b$; $Ex=e$; donde A(mxn); E(lxn)} / $A_1x=b_1\ \wedge\ A_2x<b_2$ siendo $A^T=(A_1^T,A_2^T)\ \wedge\ b^T=(b_1^T,b_2^T)$. Luego, un vector $d \neq 0$ es *una dirección factible* en x si y solo si $A_1 d \leq 0\ \wedge\ Ed=0$. Por otra parte, $d \in R^n$ es *una dirección de mejora* en x si $\nabla f(x)d<0$. (para problema de minimización). La intersección del conjunto de direcciones factibles con el conjunto de direcciones de mejora, define el conjunto de *direcciones factibles y de mejora*.

Método del Gradiente Reducido de Wolfe (G.R.): Se basa en reducir la dimensión

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

del dominio del problema representando todas las variables en término de un subconjunto de variables independientes. Sea el NLP min f(x) s.a:{Ax=b; $x \geq 0$; $x \in R^n$} donde A(mxn) es una matriz de rango *m* y f(x) es una función continua y diferenciable sobre R^n. Se considera además, que cualesquiera m columnas de A son linealmente independientes y todo punto extremo de la región factible tiene m variables > 0 (no degenerado). Con esta consideración, toda solución factible tiene como mínimo m variables > 0 y como máximo (n-m) variables iguales a cero. Siguiendo la estrategia general formulada arriba, en primer lugar el método debe proponer una estrategia para calcular una dirección factible y de mejora:

(i) *Cálculo de una dirección factible y de mejora*:

Con las consideraciones anteriores, A puede descomponerse en: A=(B,N) $\wedge$ $x=(x_B^T; x_N^T)^T$, donde B(mxm) es una matriz no singular, $x_B>0$ $\wedge$ $x_N \geq 0$. Sea $\nabla f(x)=(\nabla_B f(x); \nabla_N f(x))$ donde: $\nabla_B f(x)$ es el gradiente de f(x) asociado a x_B $\wedge$ $\nabla_N f(x)$ es el gradiente de f(x) asociado a x_N .

Por el Teorema XI.11 $d \in R^n$ es una dirección:

factible en x si $Ad=0 \wedge d_j \geq 0 \ \forall \ x_j=0$, y

de mejora en x si $\nabla^T f(x)d<0$.

Análisis de la condición de factibilidad:

Siendo $d=(d_B^T; d_N^T)^T$ resulta:

$$Ad = (B,N)(d_B^T,d_N^T)^T= Bd_B+Nd_N=0.$$

Si B es no singular, su inversa $\exists$, luego, se obtiene: $d_B=-B^{-1}Nd_N$.

Luego, la condición de factibilidad se reduce a:

$$d_B= -B^{-1}Nd_N \wedge d_j \geq 0 \ \forall \ x_j=0,$$

Análisis de la condición de mejora:

$$\nabla f(x)d = (\nabla_B f(x),\nabla_N f(x)) (d_B^T,d_N^T)^T = \nabla_B f(x)d_B+\nabla_N f(x) d_N$$

Reemplazando el valor obtenido de d_B que verifica la condición de factibilidad se tiene:

$$\nabla f(x)d = \nabla_N f(x)d_N -\nabla_B f(x)B^{-1}Nd_N<0.$$

Luego, definiendo a $r_N = \nabla_N f(x)-\nabla_B f(x)B^{-1}N$ como el *Gradiente Reducido*, la condición de mejora queda formulada como:

$$\nabla f(x)^T d = r_N^T d_N<0$$

Por lo tanto, para que $d \in R^n$ sea una dirección factible y de mejora en x, d_N debe elegirse tal que se verifique:

$$r_N^T d_N<0, \quad d_{Nj} \geq 0 \ \forall \ x_{Nj} =0$$

Una regla práctica que permite obtener un d_N verificando estas condiciones es:

Si $r_{Nj} \leq 0$ asignar $d_{Nj} = - r_{Nj}$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Si No, asignar $d_{Nj} = - x_{Nj}\, r_{Nj}$.

Obtenido d_N, d_B se calcula de manera tal que verifique la restante condición de factibilidad. Esto es:

$$d_B = -B^{-1}Nd_N.$$

El $d=(d_B^T; d_N^T)^T$ así obtenido será una *dirección factible y de mejora en x* para el problema considerado.

Una vez calculada la dirección factible y de mejora, siguiendo la estrategia general es necesario realizar la búsqueda univariable:

(ii) *Búsqueda Univariable*:

Sea $x_k \in E^n$ un punto factible asociado a la iteración k y $d_k \in R^n$ una dirección factible y de mejora, el siguiente punto está dado por $x_{k+1}= x_k+\lambda_k\, d_k$ donde λ_k se obtiene de resolver el siguiente problema univariable:

$$\min f(x_k+\lambda d_k) \ \text{s.a:}\{ \text{(a)}\ A(x_k+\lambda d_k)=b;\ \text{(b)}\ x_k+\lambda d_k \geq 0\ ;\ \lambda>0\}$$

Suponiendo que en x_k el conjunto de restricciones toma los siguientes valores: $Ax_k=b$; $x_{Bk}>0$ y $x_{Nk}\geq 0$. Luego, por el Teorema XI.11 se tiene: $Ad_k=0$ y $x_{Nk}d_{Nk}\geq 0$ por ser d_k una dirección factible en x_k. Con esto, las restricciones resultarán:

(a) $Ax_k+\lambda_k Ad_k=b \Rightarrow$ restricciones redundantes, y

(b) $x_k+\lambda_k d_k\geq 0 \quad \Rightarrow \lambda_k d_k \geq -x_k$.

De este modo, el problema univariable se reduce a:

$$\min f(x_k+\lambda d_k) \quad \text{s.a:}\{0<\lambda\leq\lambda_{MAX}\}$$

donde: $\lambda_{MAX} = \text{Sup}\{\lambda\ /\ \lambda_k d_k \geq -x_k\}$

Resulta así un problema de optimización univariable con un intervalo de incertidumbre definido. El mismo puede ser resuelto utilizando algún algoritmo de optimización univariable tal como el método de la Sección Dorada.

ALGORITMO

Dado el NLP $\min f(x)\ x\in R^n$ s.a.:$\{Ax=b,\ x\geq 0\}$

Etapa Inicial

Encontrar un punto x_1 factible. Hacer k=1, definir $\varepsilon> 0$, M suficientemente grande

Hacer I_k={índices de las m variables más positivas de x_k}

Hacer $B=(a_j\ /\ j\in I_k)$ (matriz asociada a las variables x_B)

Hacer $N=(a_j\ /\ j\notin I_k)$ (matriz asociada a las variables x_N)

Hacer $\Gamma_N = \nabla_N f(x_k)-\nabla_B f(x_k)B^{-1}N$

Etapa principal

Mientras $\|\Gamma_N\| >\varepsilon$

Hacer I_k={índices de las m variables más positivas de x_k}

Hacer $B=(a_j\ /\ j\in I_k)$ (matriz asociada a las variables x_B)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Hacer $N=(a_j \,/\, j \notin I_k)$ (matriz asociada a las variables x_N)
Hacer $\Gamma_N = \nabla_N f(x_k) - \nabla_B f(x_k) B^{-1} N$
Para todo $j \in I_k$
Si $r_{Nj} \leq 0$
asignar $d_{Nj} = - r_{Nj}$.
Si No
asignar $d_{Nj} = - x_{Nj}\, r_{Nj}$.
Fin Si
Fin Para
Hacer $d_B = -B^{-1} N d_N$.
Hacer $d_k = (d_B^T, d_N^T)^T$
Hacer $\lambda_{MAX} = M$, $i=1$
Mientras $i \leq n$
Si $d_{ki} > 0$
asignar $\lambda_{MAX} = \text{mínimo}\{ \lambda_{MAX} , - x_{kj} / d_{kj} \}$
Fin Si
Hacer $i=i+1$
Fin Mientras
Calcular λ_k solución óptima de $\min_\lambda f(x_k+\lambda d_k)$ s.a.: $0 \leq \lambda \leq \lambda_{MAX}$
Hacer $x_{k+1}=x_k+\lambda_k d_k$
Hacer $k=k+1$
Fin Mientras

Ejemplo: Resolución del siguiente NLP usando el algoritmo de Wolfe.

$$\min f(x) = 2 x_1^2 + 2 x_2^2 - 2 x_1 x_2 - 4 x_1 - 6 x_2$$

sujeto a:

$$x_1 + x_2 \leq 2$$
$$x_1 + 5x_2 \leq 5$$
$$x_1;\ x_2 \geq 0$$

Se transforma el problema al formato base del algoritmo:

$$\min f(x) = 2 x_1^2 + 2 x_2^2 - 2 x_1 x_2 - 4 x_1 - 6 x_2 + 0 x_3 + 0 x_4$$

s.a.:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 2$$
$$x_1 + 5x_2 + x_4 = 5$$
$$x_1;\ x_2;\ x_3;\ x_4 \geq 0$$

Punto Inicial $x_1 = (0; 0; 2; 5)^T$. $m = 2$ (2 restricciones de =) $\Rightarrow$ 2 variables básicas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Iteración 1:

Se eligen las dos variables más positivas como x_B ⇒ $I_1 = \{3, 4\}$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 5 & 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad N = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{bmatrix}$$

Cálculo del gradiente reducido $r_N = \nabla_N f(x_k) - \nabla_B f(x_k) B^{-1} N$:

$$\nabla_N^T f(x_1) = [(4x_1 - 2x_2 - 4); (4x_2 - 2x_1 - 6)]_{(0,0,2,5)} = (-4, -6)$$

$$r_N^T = (-4, -6) - (0, 0) . \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{bmatrix}$$

Luego, el gradiente reducido es: $r_N^T = (-4, -6)$

Aplicando la Regla se determina la componente no básica de la dirección como:
$d_N = (d_1; d_2) = (4; 6)$

La componente básica de la dirección se obtiene como: $d_B = -B^{-1} N d_N$

$$d_B = (d_3; d_4) = -\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \end{pmatrix} = (-10; -34)$$

Luego, la dirección factible y de mejora obtenida es $d = (d_1;d_2;d_3;d_4) = (4;6;-10;-34)$

Ahora se resuelve el problema de búsqueda lineal:

$$\min f (x_1 + \lambda\, d_1) \quad \text{sa. } 0 \le \lambda \le \lambda_{máx}$$

Cálculo de $\lambda_{máx}$:

$$\lambda_{máx} = \min\left[-2/-10\, ; -5/-34\right] = 5/34$$

Reemplazando x_1 y d_1 se tiene:

$$\min f\left[(0;0;2;5) + \lambda(4;6;-10;-34)\right] = f(4\lambda;6\lambda;2-10\lambda;5-34\lambda)$$

s.a.:

$$0 \le \lambda \le 5/34$$

Reemplazando en f(x) se tiene:

$$\text{mín } F(\lambda) = (56\,\lambda^2 - 52\,\lambda)$$
$$\text{s.a.: } 0 \leq \lambda \leq 5/34$$

Para un resultado académico, se resuelve aplicando condición necesaria de óptimo local no condicionado a F(λ), esto es:

$$\frac{dF}{d\lambda} = 112\,\lambda - 52 = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda = 52/112$$

El mínimo del problema irrestricto es λ= 52/112 el cual cae fuera del intervalo factible, por lo tanto se adopta como mínimo del problema el límite superior del intervalo: λ_1^*=5/34.

El nuevo punto será:

$$x_2 = x_1 + \lambda_1^* d_1 = (0;0;2;5) + \frac{5}{34}(4;6;-10;-34) = \left(\frac{10}{17};\frac{15}{17};\frac{9}{17};0\right)$$

Iteración 2:

Se eligen las dos variables más positivas como $x_B \Rightarrow I_2 = \{1, 2\}$

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \qquad N = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se calcula el gradiente de la función en x_2:

$$\nabla f(x_2) = \left(-\frac{58}{17};-\frac{62}{17};0;0\right)$$

Cálculo del gradiente reducido $r_N = \nabla_N f(x_k) - \nabla_B f(x_k) B^{-1} N$:

$$r_N = (0;0) - \left(-\frac{58}{17};-\frac{62}{17}\right)\begin{bmatrix} 5/4 & -1/4 \\ -1/4 & 1/4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \left(\frac{57}{17};\frac{1}{17}\right)$$

Aplicando la Regla se determina la componente no básica de la dirección como:

$$d_N = [d_3;d_4] = [-x_3 r_{N3};\, -x_4 r_{N4}] = [-513/289;\, 0]$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

La componente básica de la dirección se obtiene como: $d_B = -B^{-1}Nd_N$

$$d_B^T = (d_1; d_2) = -\begin{bmatrix} 5/4 & -1/4 \\ -1/4 & 1/4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{pmatrix} -513/289 \\ 0 \end{pmatrix} = (2.565/1.156; -513/1.156)$$

Luego, la dirección factible y de mejora obtenida es:

$$d_2 = (d_1; d_2; d_3; d_4) = \left(\frac{2.565}{1.156}; -\frac{513}{1.156}; -\frac{513}{289}; 0 \right)$$

Ahora se resuelve el problema de búsqueda lineal:

$$\begin{array}{l} \min f(x_2 + \lambda\, d_2) \\ \text{sa. } 0 \le \lambda \le \lambda_{\text{máx}} \end{array}$$

Cálculo de $\lambda_{\text{máx}}$:

$$\lambda_{máx} = \min\left[-x_2/-d_2; -x_3/d_3\right] = \min\left[-15\,1.156/-17\,513; -9\,289/-17\,513\right] = 17/57$$

Reemplazando x_2 y d_2 se tiene:

$$\begin{array}{l} \text{mín } F(\lambda) = (12{,}21\,\lambda^2 - 5{,}95\,\lambda - 6{,}436) \\ \text{sa.: } 0 \le \lambda \le 17/57 \end{array}$$

Nuevamente, se resuelve aplicando condición necesaria de óptimo local no condicionado a $F(\lambda)$, esto es:

$$\frac{dF}{d\lambda} = 24{,}42\,\lambda - 5{,}95 = 0 \quad \rightarrow \quad \lambda_2^* = 5{,}95/24{,}42$$

El mínimo del problema irrestricto es $\lambda = 5{,}95/24{,}42$ el cual cae dentro del intervalo factible, por lo tanto se adopta como mínimo del problema. El nuevo punto será entonces:

$$x_3 = x_2 + \lambda_2^* d_2 = \left[\frac{35}{31}; \frac{24}{31}; \frac{3}{31}; 0\right]$$

Iteración 3:
Se eligen las dos variables más positivas como $x_B \Rightarrow I_3 = \{1, 2\}$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 5 \end{bmatrix} \qquad N = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Se calcula el gradiente de la función en x_3:

$$\nabla f(x_3) = \left(-\frac{32}{31}; -\frac{160}{31}; 0; 0 \right)$$

Cálculo del gradiente reducido $r_N = \nabla_N f(x_k) - \nabla_B f(x_k) B^{-1} N$:

$$r_N = (0;0) - \left(-\frac{32}{31}; -\frac{160}{31} \right) \begin{bmatrix} 5/4 & -1/4 \\ -1/4 & 1/4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \left(0; \frac{32}{31} \right)$$

Aplicando la Regla se determina la componente no básica de la dirección como:

$$d_N = [d_3; d_4] = [-x_3 r_{N3}; -x_4 r_{N4}] = [0; 0]$$

La componente básica de la dirección se obtiene como: $d_B = -B^{-1} N d_N$
Dado que $d_N = (0; 0)$ resulta $d_B = (0; 0)$. Por lo tanto se obtiene que
$d_3 = (0; 0; 0; 0)$ lo cual implica que en x_3 no existe una dirección factible y de mejora. Esto nos indica que x_3 es un punto de Kuhn Tucker (Teorema XI.6).

Método del Gradiente Reducido Generalizado (GRG): La estrategia del *gradiente reducido* del algoritmo de Wolfe puede ser extendida para resolver NLP en general (con restricciones no lineales). En esta sección se describe una estrategia que constituye la base del método GRG. Para ello se considera el NLP:

$$\min f(x) \quad \text{s.a:}\{h_k(x)=0 \;\; \forall\, k=1,...,m\}$$

Dado que las restricciones son no lineales, para representar las m variables dependientes x_B en función de las (n-m) variables independientes x_N se realiza una linealización de cada una de las restricciones en el punto factible actual mediante una expansión de Taylor de primer orden. Sea $x_1 \in R^n$ un punto factible del problema, la aproximación lineal en x_1 vendrá dada por $H_k(x,x_1) \approx \nabla^T h_k(x_1)(x-x_1)$ $\forall$ k=1,...,m. Luego se utiliza la aproximación lineal para generar un nuevo punto x / $\nabla^T h_k(x_1)(x-x_1)=0$ $\forall$ k=1,...,m.
Siendo $x^T=(x_B^T, x_N^T)$, definiendo:

$$J^T(x_1) = (\nabla_B h_1(x_1), \ldots \nabla_B h_k(x_1), \ldots \nabla_B h_m(x_1))$$
$$C^T(x_1) = (\nabla_N h_1(x_1), \ldots \nabla_N h_k(x_1), \ldots \nabla_N h_m(x_1))$$

Suponiendo que $J(x_1)^{-1}$ $\exists$, el nuevo punto verificará: $(x_B - x_{B1}) = -J(x_1)^{-1} C(x_1)(x_N - x_{N1})$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Definiendo: $d_B = (x_B - x_{B1}) \wedge d_N = (x_N - x_{N1})$ la expresión anterior resulta en:

$$d_B = -J(x_1)^{-1}C(x_1)d_N.$$

Reemplazando en la función objetivo x_B por su relación con x_N utilizando la aproximación lineal resulta:

$$f((x_B, x_N) = f((x_{B1} - J(x_1)^{-1}C(x_1)(x_N - x_{N1})), x_N) = F(x_N)$$

De esta manera se ha transformado el problema restringido en un problema irrestricto aproximado: min $F(x_N)$ $x_N \in R^{n-m}$, definido en el dominio reducido R^{n-m}. Usando la regla de la cadena para derivación de funciones implícitas se obtiene el gradiente de la función en el espacio reducido como:

$$\nabla_N F(x) = \nabla_N f(x) - \nabla_B f(x) J(x_1)^{-1} C(x_1).$$

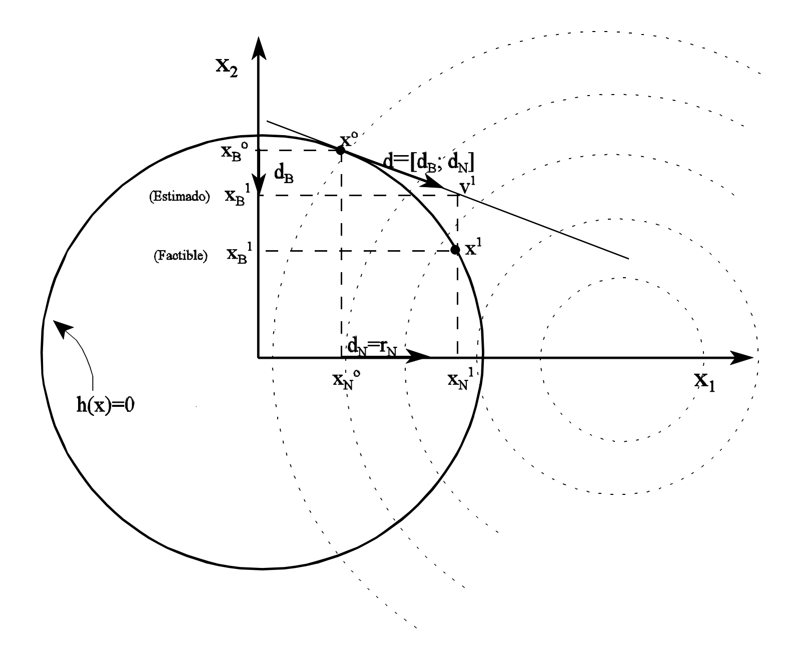
El vector $\nabla_N F(x)$ se denomina *Gradiente Reducido Generalizado*.

Asignando arbitrariamente, en el punto x_k actual, $d_N = -\nabla_N F(x_k)$ y luego calculando el valor de $d_B = -J(x_k)^{-1}C(x_k)d_N$, la dirección de búsqueda $d=(d_B,d_N) \in R^n$ será una *dirección descendente* y en general *no factible* para toda restricción $h_k(x)= 0$ no lineal.

Dado x^o factible, la linealización de $h(x)$ en x^o genera una recta tangente a la curva en x^o.

Se representan estos conceptos en el siguiente gráfico:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



El punto $v^1 = x^o + \lambda d$ alcanzado mediante un desplazamiento λ en la dirección d desde x^o es *no factible*; $h(v^1) \neq 0$. v_1 resulta no factible porque para una variación elegida en el valor de las variables independientes $(x_N - x_N^o)$, el cambio en el valor de las variables dependientes $(x_B - x_B^o)$ calculado usando la aproximación lineal no es suficientemente exacto como para dar un valor de x_B que satisfaga la restricción $h_k(x_N, x_B) = 0 \ \forall$ k=1,...,m. Esto se puede solucionar mediante la siguiente estrategia:

Buscar el mínimo de f(x) a lo largo de la *curva implícitamente definida* por los valores de λ y x_B que satisfacen las ecuaciones: $h_k(x_N + \lambda d_N,\ x_B + \lambda d_B) = 0 \ \forall$ k=1,...,m.

Luego, para cada valor de λ (en la búsqueda del óptimo), será necesario resolver el sistema de ecuaciones anterior para obtener el valor de x_B factible correspondiente. Este sistema se resuelve mediante el método de Newton:

$x_B^{i+1} = x_B^i - J^{-1}(x^i)h(x^i)$, donde $h^T(x^i) = (h_1(x^i), .. h_k(x^i), .. h_m(x^i))$ y $x^i = (x_N + \lambda d_N, x_B^i + \lambda d_B)$.

De este modo se puede obtener un nuevo punto x^1 factible que mejora el valor de la función objetivo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ALGORITMO

Dado el NLP min f(x) $x\in R^n$ s.a.:{$h_l(x)=0$, $\forall$ $l=1,\dots m$ siendo $m<n$}

Etapa Inicial

Encontrar un punto x_1 factible. Hacer k=1, definir $\varepsilon_1 > 0$, $\varepsilon_2 > 0$, $\varepsilon_3 > 0$, $\lambda=\lambda_0$, $0<\gamma<1$, MaxIter (número admitido de iteraciones sin converger)

Elegir una partición de x en x_B , x_N tal que $J(x_k)$ sea no singular

Calcular $r_N = \nabla_N f(x_k)-\nabla_B f(x_k)J^{-1}(x_k)C(x_k)$

Etapa principal

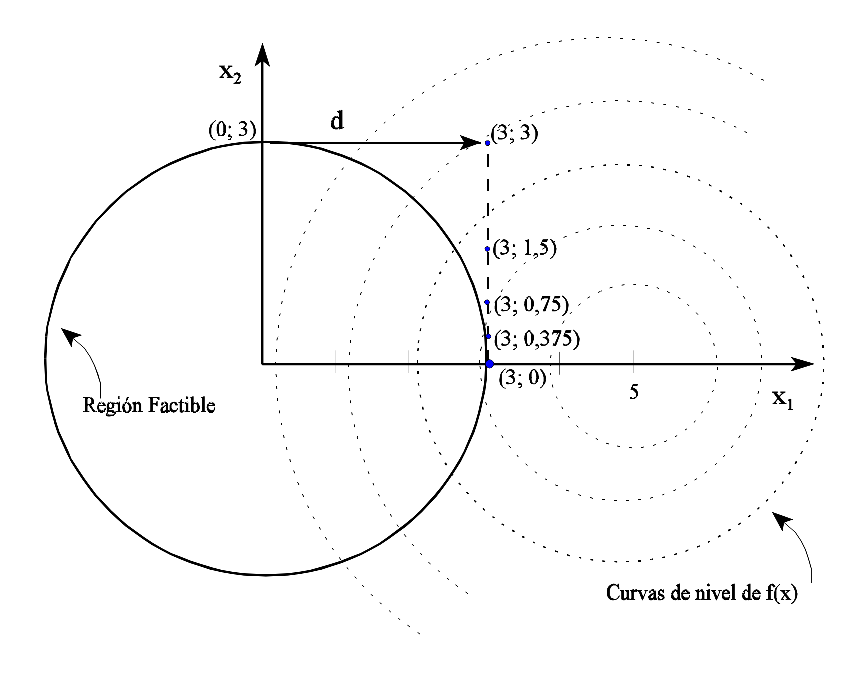
Mientras $\|r_N\| \geq \varepsilon_1$
- asignar $d_N = - r_N$
- Hacer $d_B = - J^{-1}(x_k)C(x_k)d_N$.
- Hacer $d_k = (d_B^T, d_N^T)^T$
- Hacer $\lambda=\lambda_0$, i=1, $v^{(i)}= x_k+\lambda d_k$
- Mientras $f(x_k)\leq f(v^{(i)})$ y $\exists |h_l(v^{(i)})| > \varepsilon_2$, $\forall$ $l=1,\dots m$
  - Mientras $\exists$ $|h_l(v^{(i)})| > \varepsilon_2$, $\forall$ $l=1,\dots m$
    - Hacer $v_B^{(i+1)} = v_B^{(i)}-J^{-1}(v^{(i)})h(v^{(i)})$ $\{h^T(v^{(i)})=(h_l(v^{(i)}))\}$
    - Hacer $v_N^{(i+1)} = v_N^{(i)}$
    - Mientras $\|v_B^{(i+1)}-v_B^{(i)}\| \geq \varepsilon_3$ o i $\leq$MaxIter
      - Hacer i=i+1
      - Hacer $v_B^{(i+1)}=v_B^{(i)}-J^{-1}(v^{(i)})h(v^{(i)})$ $\{ h^T(v^{(i)})=(h_l(v^{(i)}))\}$
      - Hacer $v_N^{(i+1)}=v_N^{(i)}$
    - Fin Mientras
    - Si $\exists$ $|h_l(v^{(i)})| \geq \varepsilon_2$, $\forall$ $l=1,\dots m$
      - Hacer $\lambda=\lambda\gamma$
      - Hacer i=1, $v^{(i)}= x_k+\lambda d_k$
    - Fin Si
  - Fin Mientras
  - Si $f(x_k)\leq f(v^{(i+1)})$
    - Hacer $\lambda=\lambda\gamma$
    - Hacer i=1, $v^{(i)}= x_k+\lambda d_k$
  - Fin Si
- Fin Mientras
- Hacer $x_{k+1}=x_k+\lambda_k d_k$
- Hacer k=k+1
- Calcular $r_N = \nabla_N f(x_k)-\nabla_B f(x_k)J^{-1}(x_k)C(x_k)$

Fin Mientras

Ejemplo: Se resuelve utilizando el algoritmo GRG, el siguiente NLP:

$$\min f(x) = (x_1 - 5)^2 + x_2^2$$
$$\text{sa.:} \quad x_1^2 + x_2^2 = 9$$

Representación gráfica:



Iteración 1:

Se elige arbitrariamente la partición $x_B = x_2$ y $x_N = x_1$

$$J = \left[\frac{\partial h}{\partial x_2}\right] = 2x_2 \qquad J^{-1} = \frac{1}{2x_2} \qquad J^{-1}_{(x°)} = \frac{1}{6} \qquad C = \left[\frac{\partial h}{\partial x_1}\right] = 2x_1 \qquad C_{(x°)} = 0$$

Cálculo del gradiente reducido:

$$r_N(x°) = \nabla_{x_N} f(x°) - \nabla_{x_B} f(x°)\,.\,J^{-1}(x°)\,.\,C(x°) = [2\,(x_1 - 5) - 2x_2\,.\,\frac{1}{6}\,.\,0]_{x°} = -10$$

Luego, la componente no básica de la dirección de búsqueda se elige como:

$d_N = -r_N = 10$

La componente básica de la dirección de búsqueda se calcula como: $d_B = -J(x^0)^{-1}C(x^0)d_N$

$d_B = -1/6 \,.\, 0 \,.\, 10 = 0$

Luego, la dirección generada será: $d = (d_1; d_2) = (10; 0)$

Un desplazamiento λ desde x^0 en la dirección d genera un nuevo punto v^1

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$v^1 = x° + \lambda d = (0;3) + \lambda(10;0)$$

Se propone arbitrariamente λ=3/10, con lo cual el nuevo punto será v^1 =(3;3).
Se verifica si el punto v^1 =(3;3) es factible:

$$|h(v^1) - b| = |3^2 + 3^2 - 9| = 9 > \varepsilon_2$$

Luego, v^1 =(3;3) es no factible. Dado que v_N^1 es una variable independiente su valor pudo ser fijado arbitrariamente, por lo tanto se considera que la no factibilidad es causada por la variable dependiente v_B^1 la cual fue estimada usando la aproximación lineal de la restricción. Por esta razón se intentará modificar el valor de v_B^1 hasta un valor tal que haga cero (verifique) la restricción. Para ello se utiliza el método de Newton iterando sobre v_B^1.

i=1

$$v_B^2 = v_B^1 - j_{(v^1)}^{-1} . h_{(v^1)} \quad \Rightarrow \quad v_B^2 = 3 - (1/6)\,9 = 1{,}5$$

$$\|v_B^2 - v_B^1\| = \|3 - 1{,}5\| = 1{,}5 > \varepsilon_3$$

i=2

$$v_B^3 = 1{,}5 - 1/3\left[3^2 + (3/2)^2 - 9\right] = 0{,}75$$

$$\left\|v_B^3 - v_B^2\right\| = \|(3/4 - 3/2)\| = 0{,}75 > \varepsilon_3$$

i=3

$$v_B^4 = 0{,}75 - 2/3\,(3^2 + 0.75^2 - 9) = 0{,}375$$

Se puede ver que $v_B^{i+1} \to 0$, luego se obtiene que v^i = (3;0).
Se evalúa la función objetivo:

$$f(x°) = 34 \quad y \quad f(v^i) = 4 \quad \Rightarrow \quad f(x°) > f(v^i) \Rightarrow \textit{mejoró el valor de la función}$$

Luego, $x^1 = v^i$ = (3;0)

Iteración 2:

Se elige arbitrariamente la partición $x_B = x_1$ y $x_N = x_2$

$$J = \left[\frac{\partial h}{\partial x_1}\right] = 2x_1 \qquad J^{-1} = \frac{1}{2x_1} \qquad J_{(x^1)}^{-1} = \frac{1}{6} \qquad C = \left[\frac{\partial h}{\partial x_2}\right] = 2x_2 \qquad C_{(x^1)} = 0$$

Cálculo del gradiente reducido:

$$r_N(x^1) = \nabla_{x_N} f(x^1) - \nabla_{x_B} f(x^1) . J^{-1}(x^1) . C(x^1) = [2x_2 - 2(x_1 - 5)(1/6)\,0]_{x^1} = 0$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$r_N = 0 < \varepsilon_1 \Rightarrow x^1 = (3;0)$ verifica la condición necesaria de mínimo de Kuhn - Tucker

Finalmente, es necesario destacar que el objetivo de este capítulo ha sido realizar una descripción conceptual de la teoría y los algoritmos de optimización. Por esta razón su alcance se ha limitado a presentar los principales enunciados teóricos y los algoritmos básicos, apuntando así a dar una visión global con cierto detalle del concepto de optimización.

El lector que desee estudiar en profundidad la teoría y los algoritmos de optimización deberá recurrir a textos especializados. Algunos de los más convencionales se listan como referencia del presente capítulo.

EJERCICIOS PROPUESTOS

EJ.1: Una empresa industrial elabora 5 productos diferentes, designados genéricamente como Pj j=1,...5. Los productos son elaborados a partir de 4 materias primas diferentes designadas como MPi i=1,...4. En la tabla siguiente se especifican los precios de venta de cada uno de los productos, los costos de las materias primas, y las unidades de cada tipo de materia prima requerida para producir una unidad del producto.

Precio de venta del producto: ($ / unidad de producto)				
P1	P2	P3	P4	P5
3	5	2	1.7	4.5

Costo de la materia prima: ($ / unidad de materia prima)			
MP1	MP2	MP3	MP4
0.7	1.5	1.2	2

Requerimiento de materia prima: (unidades de materia prima / unidades de producto)					
	P1	P2	P3	P4	P5
MP1	1	2	1.2	0	0.5
MP2	1.3	0	1.4	0.5	0
MP3	0	0.8	0.8	0.8	2
MP4	0.2	1.2	0	0	1.8

Disponibilidad de materia prima (unidades)			
MP1	MP2	MP3	MP4
250	180	300	12

Todos los costos son asignados a la materia prima, de modo tal que llegan al producto a través del requerimiento de materia prima por parte del producto.
Se requiere determinar:
a) La política de producción que maximice el ingreso bruto por ventas.
b) La política de producción que maximice el ingreso neto por ventas.
c) La política de producción que minimice el costo de las materias primas
d) Considerando ahora la información de la estimación de demanda dada en la siguiente tabla, determinar la política óptima de producción.

Estimación de demanda de producto (unidades de producto)				
P1	P2	P3	P4	P5
50	100	70	200	40

En cada uno de los casos modelar el problema y luego resolverlo usando algún optimizador disponible. (Por ejemplo pude utilizar el *solver* de la planilla Excel).
Analizar y comparar los resultados de los distintos modelos.

EJ.2: Dado el LP: min $f(x) = 4\,x_1 + x_2$; s.a.: $\{x_1 + 3x_2 \leq 9$; $2\,x_1 - x_2 \leq 4$; $x_1, x_2 \geq 0\}$
a) Resolver gráficamente
b) Resolver siguiendo el algoritmo SIMPLEX para LP.
c) Resolver usando un optimizador disponible.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

EJ.3: Dado el NLP min $f(x)= 2x_1 + x_1 x_2 - 3x_1 x_2^2$
Resolver usando condición necesaria y suficiente de óptimo.

EJ.4: Dado el NLP opt $f(x) = (3-x_1)^2 + x_2^2$ s.a.:$\{x_1^2 + (2-x_2)^2 = 9\}$
Resolver usando condición necesaria y suficiente de óptimo.

EJ.5: Dado el NLP min $f(x) = (3-x_1)^2 + x_2^2$ s.a.:$\{x_1^2 + (2-x_2)^2 \leq 9\}$
Resolver usando condición necesaria y suficiente de óptimo.
Nota: dado que la condición necesaria de óptimo fue desarrolada para un problema de maximización, es necesario tener en cuenta que min $f(x) = -\max -f(x)$

EJ.6: Dado el NLP min $f(x) = 3x - (5-x)^2$
a) Resolver usando el método de la Sección Dorada
b) Resolver usando el método de Newton.

EJ.7: Dado el NLP min $f(x)= 2x_1 + x_1 x_2 - 3x_1 x_2^2$
a) Resolver usando el método Coordenado Cíclico
b) Resolver usando el método de Hooke and Jeeves
c) Resolver usando el método de direcciones conjugadas D.F.P.

EJ.8: Dado el NLP min $f(x) = x_1^2 + (8+x_2)^2$ s.a.:$\{x_1 + 3x_2 \leq 9 ;\ 2x_1 - x_2 \leq 4;\ x_1, x_2 \geq 0\}$
a) Resolver usando condición necesaria y suficiente de óptimo
b) Resolver usando el algoritmo de Wolfe (GR)
c) Resolver utilizando un optimizador disponible (por ejemplo el solver de Excel)

EJ.9: Dado el NLP opt $f(x) = (2-x_1)^2 + x_2^2 - 4x_3$
s.a.:$\{x_1^2 + (2-x_2)^2 + x_3^2 = 9 ;\ (2-x_1)^2 + x_2^2 = 9\}$
a) Resolver usando condición necesaria y suficiente de óptimo.
b) Resolver usando el algoritmo GRG.
c) Resolver utilizando un optimizador disponible (por ejemplo el solver de Excel).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA

- Bazaraa,M.S., J.J.Jarvis & H.D. Sherali, *Linear Programinng and Network Flows.John* Wiley & Sons, New York, Second Edition (1990).
- Bazaraa,M.S., H.D. Sherali & C.M.Shetty, *Nonlinear Programinng. Theoty and Algorithms*, John Wiley & Sons, New York, Second Edition (1993).
- Budnick,F.S., R. Mojena & T.E.Vollmann, Principles of operations Reseach for Management, R.D. Irwin, Inc. (1977).
- Cohon, J.L., Multiobjective Programming and Planning, Academic press, N.Y., (1978).
- Fletcher, R., *Practical Methods of Optimization*, Vol I y II, John Wiley 7 Sons, New York (1981) .
- Halemane and Grossmann,I.E., 1983, Optimal process design under Uncertainty, AIChEJ, 29(3):425-433.
- Lasdon, L.S., optimization Theory for large Systems, The MacMillan Company, London, (1970).
- Luemberger,D.G., *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Addison-Wesley Publishing Company, (1973).
- Reklaitis G.V., & Ravindran A., *Engineering Optimization. Methods and Applications.* John Wiley & Sons, New York (1983).
- Siddall,J.N., Optimal Engineering Design, M. Dekker Inc. New York and Basel (1982).
- Simmons, D.M., *Nonlinear Programming for Operations Research*, Prentice-Hall Inc., New Jersey (1975).
- Taha,H.A., Investigación de Operaciones, 5/ED, ALFAOMEGA, (1994).
- Winston, Investigación de Operaciones, IIBEROAMERICA, (1994).

APÉNDICE

Definiciones

El vector Gradiente: Sea $f:R^n \rightarrow R^1$ continua y diferenciable en $x \in R^n$, el vector gradiente de f en x ∃ y se define como:

$$\nabla f(x) = \left[\frac{\partial f(x)}{\partial x_1}, \frac{\partial f(x)}{\partial x_2}, ..., \frac{\partial f(x)}{\partial x_n} \right]$$

e indica la dirección en la cual la función crece más rápidamente. Además, ∇f(x) es normal a toda dirección en la cual la velocidad (puntual) de cambio de la función es cero; esto es, ∇f(x) es perpendicular a toda superficie de la forma f(x)=k donde k es una constante.

La matriz Hessiana: Sea $f:R^n \rightarrow R^1$ continua y diferenciable dos veces en $x \in E^n$. Luego la matriz Hessiana de f en x ∃ y se define como:

$$Hf(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_1} & ... & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_1 x_n} \\ & ... & \\ \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_1} & ... & \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_n x_n} \end{bmatrix}$$

Esta matriz es simétrica y única.

Forma Cuadrática: Una forma cuadrática es cualquier $f:R^n \rightarrow R^1$ que tiene la siguiente forma:

$$q(x) = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij} \; x_i \; x_j$$

donde a_{ij} es un número real. Una forma cuadrática a diferencia de una función cuadrática, no posee términos lineales.

q(x) puede ser representada como $q(x)= x^T A x$ donde a_{ij} de A(nxn) son los coeficientes de q(x).

Toda forma cuadrática puede representarse también como $q(x)= x^T D x$ donde D es una matriz simétrica cuyos elementos son : $d_{ij}= d_{ji}= (a_{ij}+a_{ji})/2 \;\; \forall \; i \neq j \wedge d_{ii} = a_{ii}$.

Propiedad: D es única.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ es *positiva (negativa) definida* si $q(x)>0$ ($q(x)<0$) $\forall\ x\neq 0$ en E^n.

La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ es *positiva (negativa) semidefinida* si $q(x)\geq 0$ ($q(x)\leq 0$) $\forall\ x\in E^n$ pero q(x) no es positiva (negativa) definida.

Matriz positiva definida: La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ y su matriz D asociada son *positivas definidas* si y solo si las variables pueden ser ordenadas de manera tal que $d_{11}>0$ y además se verifica:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix} > 0 \qquad \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} > 0 \quad \ldots \quad |D| > 0$$

Matriz positiva semidefinida: La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ y su matriz D asociada son *positivas semidefinidas* si y solo si las variables pueden ser ordenadas de manera tal que $d_{11}>0$ y además se verifica:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix} \geq 0 \qquad \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} \geq 0 \quad \ldots \quad |D| \geq 0$$

Matriz negativa definida: La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ y su matriz D asociada son *negativas definidas* si y solo si las variables pueden ser ordenadas de manera tal que $d_{11}<0$ y además se verifica:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix} > 0 \qquad \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} < 0 \quad \ldots \quad (-1)^n|D| > 0$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Matriz negativa semidefinida: La forma cuadrática $q(x)= x^TDx$ y su matriz D asociada son *negativas semidefinidas* si y solo si las variables pueden ser ordenadas de manera tal que $d_{11}<0$ y además se verifica:

$$\begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} \\ d_{21} & d_{22} \end{vmatrix} \geq 0 \qquad \begin{vmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} \end{vmatrix} \leq 0 \quad \ldots \; (-1)^n |D| \geq 0$$

Concavidad y Convexidad: Se dice que la función $f:S\in R^n \rightarrow R^1$ es convexa en el dominio S si para dos vectores cualesquiera $x_1 \wedge x_2 \in S$ se cumple: $f(\theta x_1+(1-\theta)x_2) \leq \theta f(x_1)+(1-\theta)f(x_2) \; \forall \; \theta \in (0,1)$.
Se dice que la función $f:S\in E^n \rightarrow E^1$ es cóncava en el dominio S si para dos vectores cualesquiera $x_1 \wedge x_2 \in S$ se cumple: $f(\theta x_1+(1-\theta)x_2) \geq \theta f(x_1)+(1-\theta)f(x_2) \; \forall \; \theta \in (0,1)$.

Propiedad 1: si f(x) es convexa, -f(x) es cóncava y viceversa.
Propiedad 2: Toda función lineal es cóncava y convexa a la vez.
Propiedad 3: la suma de dos o más funciones convexas (cóncavas) es otra función convexa (cóncava).
Propiedad 4: toda función convexa o cóncava es contínua.

Otra caracterización de funciones convexas y cóncavas
Teorema: sea $f:S\in R^n \rightarrow R^1$ contínua y diferenciable dos veces en todo punto $x\in S$, siendo S un conjunto convexo. Luego, f(x) es convexa (cóncava) en S si y solo si su matriz Hessiana es positiva (negativa) definida o semidefinida $\forall \; x\in S$.

Conjunto Convexo: El conjunto de punto $S\subset R^n$ se define como convexo si $\forall \; x_1 \wedge x_2 \in S$, el segmento de recta que los une está enteramente incluido en S.

Propiedad 1: si $f:R^n \rightarrow R^1$ es convexa sobre R^n, luego el conjunto de puntos $S=\{x/f(x) \leq b\}$ donde b es un escalar cualquiera, es un conjunto convexo.
Propiedad 2: si $f:R^n \rightarrow R^1$ es cóncava sobre R^n, luego el conjunto de puntos $S=\{x/f(x) \geq b\}$ donde b es un escalar cualquiera, es un conjunto convexo.
Propiedad 3: sea $f:R^n \rightarrow R^1$, luego el conjunto de puntos $S=\{x/f(x)= b\}$ donde b es un escalar cualquiera, es un conjunto convexo si y solo si f(x) es lineal.
Propiedad 4: La intersección de dos o más conjuntos convexos es otro conjunto convexo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Región Factible Convexa: La región factible de un programa matemático es convexa (es un conjunto convexo) si se cumplen las siguientes condiciones:
(1) Para todas las restricciones $g_i(x) \leq b_i$, $g_i(x)$ es convexa.
(2) Para todas las restricciones $g_i(x) \geq b_i$, $g_i(x)$ es cóncava.
(3) Para todas las restricciones $h_i(x)=b_i$, $h_i(x)$ es lineal.
Estas son condiciones suficientes.

Conceptos de máximo y mínimo local y global: Dada la $f:S \in R^n \rightarrow R^1$ siendo S un conjunto cerrado, se define:

1. todo punto $x^* \in S$ y cumple la condición $f(x^*) \geq f(x)\ \forall\ x \in S$ define el máximo global de la función en S.
2. todo punto $x^* \in S$ y cumple la condición $f(x^*) \leq f(x)\ \forall\ x \in S$ define el mínimo global de la función en S.
3. todo punto $x^* \in S$ y cumple la condición $f(x^*) \geq f(x^*+h)\ \forall\ h=(h_1,...h_n)$ / $|h_j|$ es suficientemente pequeño $\forall$ j=1,...,n y $(x^*+h) \in S$, define un máximo local de la función.
4. todo punto $x^* \in S$ y cumple la condición $f(x^*) \leq f(x^*+h)\ \forall\ h=(h_1,...h_n)$ / $|h_j|$ es suficientemente pequeño $\forall$ j=1,...,n y $(x^*+h) \in S$, define un mínimo local de la función.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XII

OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA

Por
Jorge Marcelo Montagna

XII.1. INTRODUCCIÓN

En los últimos años se han popularizado las aplicaciones de simulación de procesos por computadora. Numerosas aplicaciones para el tratamiento de procesos específicos de diversas industrias (petróleo, petroquímica, alimentos, papel, farmacéutica, etc.), así como la amplia difusión de los paquetes comerciales de simuladores generales reflejan esta tendencia. Sin embargo, la utilización de estas herramientas de simulación para tratar problemas de optimización ha sido la que más se ha demorado. Recién en la década de los 80 hay un esfuerzo continuo que permite la resolución de este tipo de problemas. Hasta ese momento sólo técnicas muy rudimentarias, a través de la resolución de gran número de simulaciones, habían permitido tratar problemas relativamente simples con un alto consumo de recursos computacionales. En general, se trataba de enfoques que separaban la simulación de la optimización. Los métodos de programación matemática rudimentarios requerían la evaluación de distintos puntos, para cada uno de los cuales era necesario resolver una simulación completa. El optimizador era un programa separado que requería al simulador como un subprograma con escasa integración entre ambos. Esto dio lugar a altos requerimientos de cómputo que impidieron la resolución de problemas de optimización de cierta complejidad.

Sin duda se trataba de un tema pendiente pues el formato real en el cual se presentan muchos de los problemas que un ingeniero debe tratar con un simulador es el de optimización, todos los cuales habitualmente representan importantes beneficios económicos. En la mayoría de los casos, a través de consideraciones intuitivas, el ingeniero proponía varios puntos, aprovechaba las facilidades del simulador para evaluar cada alternativa, y seleccionaba el mejor, aceptándolo de algún modo como el "óptimo", Obviamente esto está muy lejos de significar un enfoque apropiado para optimizar, aunque sí razonable si se tiene en cuenta las limitaciones de los métodos empleados y la precariedad de los recursos disponibles. La disponibilidad de computadoras más rápidas y de estrategias más eficientes ha permitido resolver problemas de optimización adecuadamente.

El ingeniero químico debe tratar problemas de optimización en distintas circunstancias de su actividad:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

a. Desarrollo de procesos: durante la evaluación de alternativas de un proceso, por ejemplo para la evaluación económica de un proyecto, se debe basar la comparación en el óptimo para cada alternativa. Dado que este tipo de problemas se presenta en las primeras etapas de un proyecto, es normal utilizar modelos simplificados al comienzo y dejar los rigurosos para cuando quedan unas pocas alternativas entre las cuales elegir, y se requiere un mayor nivel de detalle.

b. Diseño de planta: una vez que se ha determinado la configuración de la planta, se utilizan los resultados de los balances de materia y energía para realizar el diseño del proceso y de los equipos, el dimensionamiento de las unidades, la estimación de costos, etc. Son importantes en este tipo de problemas los costos de las unidades y los costos operativos para determinar el diseño óptimo de la planta. Distintas alternativas pueden ser consideradas en este ámbito. Por ejemplo Doering y Gaddy (1997) optimizan la confiabilidad de un proceso.

c. Operación de la planta: esta es, probablemente, la aplicación más habitual. Sobre una planta existente se trata de optimizar su performance variando sus condiciones operativas. Esto suele estar fundado en una serie de variaciones, por ejemplo:
   - Nivel de la demanda, por motivos estacionales, de cambios de los mercados, etc.
   - Especificaciones del producto.
   - Característica de las alimentaciones al proceso.
   - Búsqueda de nuevas alternativas de producción, buscando reducir costos de servicios, incremento de la producción, etc.

En símbolos, la simulación de un proceso se puede plantear como un sistema de ecuaciones de la forma

$$h\ (x,\ u)\ =\ 0 \qquad \textbf{(1)}$$

donde las variables del mismo han sido separadas en dos conjuntos x y u. Para poder resolver este sistema de ecuaciones es preciso cubrir sus grados de libertad, para lo cual existen muchas alternativas. En particular se ha dividido el conjunto de variables en u, que contiene a las variables seleccionadas para cubrir los grados de libertad, y x, que contiene a las variables cuyo valor se determina como resultado de la simulación. Cada vez que se resuelve la simulación, el conjunto de variables u se tiene un valor predeterminado y fijo. x y u son también denominadas variables de proceso y diseño respectivamente. Matemáticamente podrían ser agrupadas en un único vector, pero desde el punto de vista del ingeniero químico, las variables de proceso

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

son obtenidas como resultado de los balances de materia y energía, mientras que las variables de diseño son utilizadas por el ingeniero para especificar el diseño del proceso. De acuerdo a la manera en que se cubran los grados de libertad u se tienen los distintos enfoques posibles para resolver la simulación.

En caso de plantearse un problema de optimización, las ecuaciones que modelan el problema pasan a formar parte del conjunto de restricciones del problema de optimización. Se tiene en ese caso un problema del tipo:

(P.1)

$$Min\ f\ (x,\ y,\ u) \quad \textbf{(2)}$$

sujeto a

$$h\ (x,\ y,\ u)\ =\ 0 \quad \textbf{(3)}$$

$$g\ (x,\ y,\ u)\ \leq\ 0 \quad \textbf{(4)}$$

$$c\ (x,\ y,\ u)\ =\ 0 \quad \textbf{(5)}$$

donde (2) corresponde a la función objetivo del problema, (3) son las ecuaciones del modelo de simulación, y (4) y (5) son las restricciones de desigualdad e igualdad del problema de optimización, respectivamente. En este caso se ha introducido un nuevo conjunto de variables y, que corresponde al conjunto de variables de decisión, o variables independientes, del problema de optimización. Esto implica que la dimensión de u se ha reducido, ya no es la misma de (1), pues algunos de sus elementos han pasado a formar parte de y. Mientras la simulación de procesos requiere la solución de un sistema de ecuaciones con el mismo número de variables que de ecuaciones, la optimización es un problema más general, en el cual el número de variables excede el número de ecuaciones, de modo que existe la posibilidad de ajuste o "trade-off" para minimizar o maximizar la función objetivo mientras se satisfacen las ecuaciones.

La función objetivo puede adoptar formas muy diversas de acuerdo al tipo de problema de que se trate: maximizar beneficios, minimizar costos, minimizar el consumo de energía, maximizar la obtención de un cierto producto o su pureza, etc.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

De igual modo para las funciones g y c existen muchas alternativas de acuerdo al modelo que desarrolle el ingeniero, empezando por los límites inferior y superior que puede alcanzar una variable, o restricciones de cota, por ejemplo a la pureza de un producto.

XII.2. EJEMPLOS.

Se presentan a continuación algunos ejemplos para mostrar distintas aplicaciones de optimización (Westerberg, 1981).

XII.2.1. Diseño de un absorbedor

La figura XII.1 muestra el diagrama de un absorbedor. Cuando se diseña un equipo de este tipo, se debe establecer la altura y el diámetro del absorbedor, el caudal de agua requerido, etc. Se pueden plantear distintos criterios a satisfacer. Por ejemplo, un objetivo podría ser encontrar la solución que requiere la mínima inversión en equipamiento y que satisface las restricciones de que al menos el 99% de la acetona y el 99,5% del éter son eliminados. Otra alternativa es encontrar la mínima cantidad de agua requerida para hacer esta tarea en una columna de 15 m de alto. Conociendo ambas respuestas se puede tener una idea de la sensibilidad del diseño a ambos criterios.

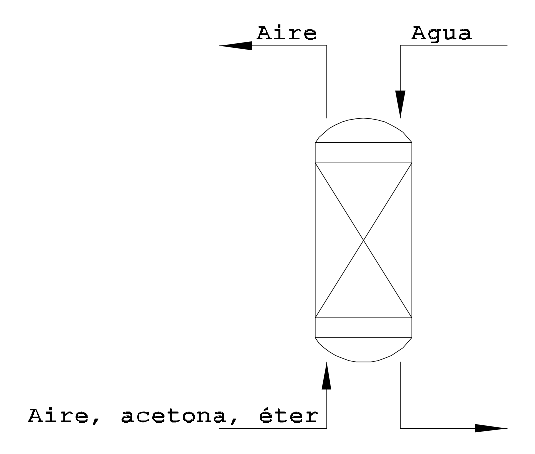


Figura XII.1

Luego de resuelto el problema inicial, se puede plantear otras cuestiones. Por ejemplo, cuánto mejora la eliminación de acetona con un aumento en la inversión de un 10%, o cuánto si se incrementa el agua un 5% sobre el mínimo. Resolver planteos de este tipo darían márgenes de seguridad al diseño del absorbedor ante posibles

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

modificaciones de la operación, por ejemplo ante consideraciones ambientales. Se tendrían así elementos para aceptar o rechazar la opción del absorbedor.

XII.2.2. Diseño de una planta completa

La figura XII.2 muestra el ejemplo de un flowsheet de una planta completa, en el cual se aumenta la presión de las dos alimentaciones, luego se calientan y finalmente reaccionan para formar el componente D. La segunda alimentación contiene al componente B, un reactivo, y al componente C, un inerte no condensable. Las partes de A y B que no han reaccionado son separadas y recicladas junto con C. El componente C debe ser removido y se incluye una corriente de purga donde la concentración de C está en el máximo en el flowsheet.

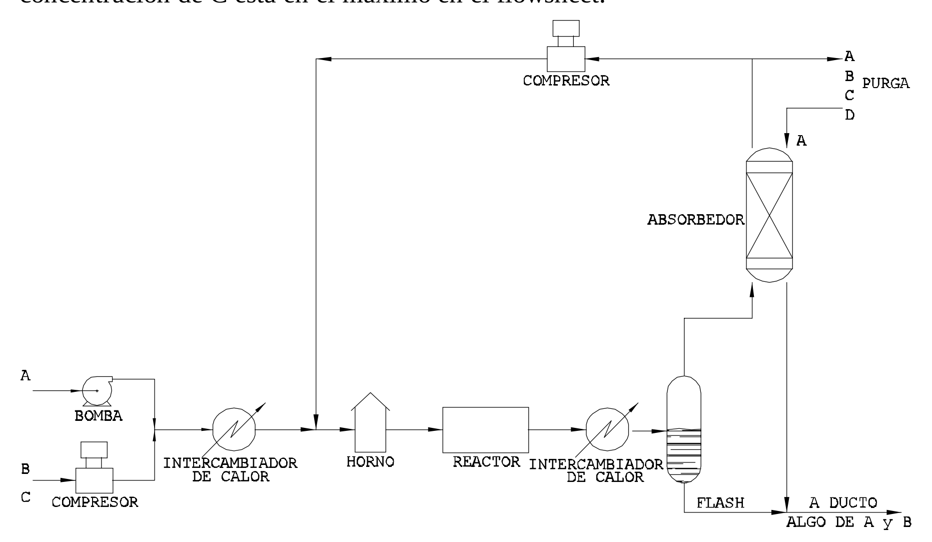


Figura XII.2

Diversas cuestiones debe tratar el diseñador. Por ejemplo determinar el diseño que minimiza la cantidad de D perdida en la purga. Puede también tratar de hallar ciertos objetivos de diseño o un mínimo uso de los servicios. La respuesta a cada una de estas cuestiones da un profundo e importante conocimiento del flowsheet, de los costos asociados y de la sensibilidad del diseño.

XII.2.3. Un problema de optimización con óptimos locales

La figura 3 muestra un problema muy simple. Se trata de dos intercambiadores de calor operando en secuencia sobre una corriente cuyo caudal y temperaturas de entrada y salida son fijas. El objetivo es minimizar el costo de inversión de los dos intercambiadores de calor.

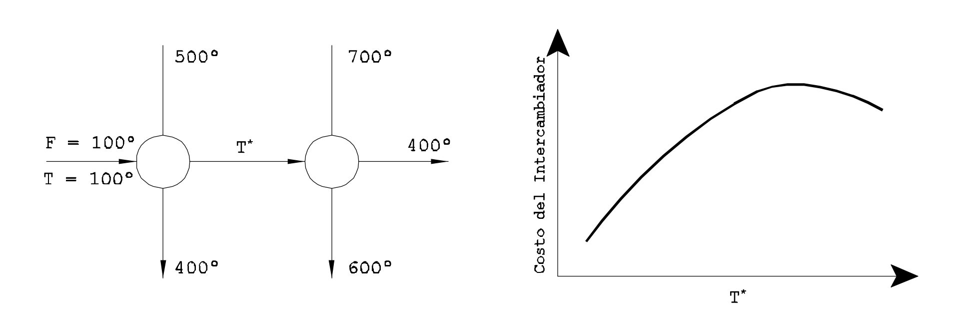


Figura XII.3

La figura 3 muestra, también, el gráfico del costo del área total de los intercambiadores versus la temperatura T*, el único grado de libertad del problema. Se debe minimizar este costo, que tiene dos mínimos locales en la frontera de la región factible. Un algoritmo de optimización, con mayor o menor dificultad, determina alguno de los óptimos locales, subsistiendo la cuestión de hallar el óptimo global del problema.

XII.3. SIMULACIÓN DE PROCESOS POR COMPUTADORA Y SU RELACIÓN CON OPTIMIZACIÓN. DISTINTOS ENFOQUES

En la simulación de procesos por computadora, cada equipo es representado mediante un sistema de ecuaciones que corresponden a los balances de materia y energía, las ecuaciones de equilibrio, ecuaciones de propiedades fisicoquímicas, etc., como muestra la figura XII.4 (Montagna et al., 1987). De acuerdo a cómo se plantee este sistema de ecuaciones para todos los equipos de la planta se tienen los distintos enfoques para la resolución del problema de simulación de procesos, cada uno con sus ventajas y desventajas. Las diferencias están fundadas en la forma de seleccionar las incógnitas del problema, o de otro modo, en la forma de cubrir los grados de libertad del modelo, y de la posterior forma en que se resuelve el sistema de ecuaciones a partir de la estructura resultante. Este tema ya fue tratado anteriormente, pero conviene repasarlo bajo la perspectiva de la optimización de procesos, pues, siendo éste de algún modo un problema que contiene a la simulación, y por lo tanto de una mayor complejidad, todas las ventajas y desventajas de los distintos enfoques se potencian.

Tal como se señalaba anteriormente, teniendo en cuenta la forma en que se resuelve el sistema de ecuaciones, pero además la manera en que se cubren los grados de libertad del sistema y el nivel de detalle del modelo, surgen los distintos enfoques para la simulación y la optimización de procesos en estado estacionario.

Se pueden distinguir tres enfoques distintos: modular secuencial, global u

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

orientado a las ecuaciones y modular simultáneo (Westerberg et al. (1979), Evans (1981), etc.).

XII.3.1. Enfoque modular secuencial

Desde que se comenzaron a utilizar los simuladores de procesos, este método ha sido el más usado. Se puede afirmar que prácticamente todos los simuladores comerciales e industriales se ajustan a este enfoque. En él se desarrolla una subrutina para cada tipo de equipo, la cual calcula sus corrientes de salida teniendo como datos las de entrada y los parámetros del mismo. Se habla en este caso de modelos orientados a la simulación por su sentido de resolución. En la figura VI.1.a, las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de operación son elegidos para cubrir los grados de libertad del sistema de ecuaciones que modela la unidad. Con todas estas subrutinas se construye una biblioteca de módulos, los cuales son llamados desde un programa principal en un determinado orden o secuencia de modo de resolver todos los equipos que componen la planta. El problema se presenta cuando existen reciclos y no es posible determinar esta secuencia para poder resolver los módulos, pues existen algunos de los cuales no se conocen todas las corrientes de entrada. En estos casos, que son muy comunes a partir de la estructura de los procesos químicos, se recurre a algoritmos de particionado y rasgado. Estos determinan aquellos conjuntos de unidades que deben ser resueltos como un grupo pues corresponden a un reciclo o a varios encadenados por nodos comunes, y luego en cada uno seleccionar un conjunto de corrientes iteradoras o de corte, que una vez rasgadas permiten la resolución de todos los equipos, eliminándose de este modo los reciclos. Con la información anterior resulta sencillo ordenar los equipos en la secuencia de resolución. Luego, teniendo valores iniciales de las corrientes de corte, se recorre repetidas veces dicha secuencia y mediante algún método de convergencia se aproximan los valores propuestos de la iteradoras a los valores correctos.

En el enfoque modular secuencial no existen alternativas. Partiendo de (1), u corresponde a las alimentaciones del sistema y a los parámetros de los equipos no habiendo otra alternativa para su selección. Para la resolución, la convergencia de las corrientes de corte puede plantearse como resolver el sistema

$$z - w(x, z) = 0 \qquad \textbf{(6)}$$

donde z son los valores propuestos para las variables de corte y w los valores calculados para las mismas. En realidad z es un subconjunto de las x, especialmente elegido para iterar durante la resolución.

La gran ventaja del enfoque modular secuencial es su gran robustez y confiabilidad. Luego de muchos años de trabajo, el modelo matemático de cada

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

unidad ha sido muy estudiado, y existen por lo tanto programas que realizan el cálculo de manera sumamente eficiente. Sobre el sistema de ecuaciones que representa la operación del equipo, dado que se conoce la forma de cada expresión, se realizan las transformaciones necesarias para reordenarlo y lograr la mejor estructura y luego, de acuerdo a lo obtenido, se aplica un método adecuado de resolución. De este modo se aprovechan las propiedades especiales de un sistema de ecuaciones determinado para acelerar la convergencia de los módulos. Además, se conoce el comportamiento físico del módulo y los resultados posibles del mismo, lo cual puede ser aprovechado para inicialización, verificación de resultados, consistencia, etc. Es por estas razones que en la mayoría de las operaciones unitarias, y en los distintos niveles de detalle, se ha logrado una notable performance y un alto nivel de desarrollo.

Si se pretende incorporar un nuevo módulo, no existen mayores problemas. En principio la confección de la nueva subrutina se puede hacer aparte, sin afectar el resto del simulador, y realizar sobre la misma todos los testeos y verificaciones necesarias. A partir de estos argumentos se puede decir, además, que resulta simple y sencillo construir un simulador que se ajuste a este método de resolución. Se pueden incorporar en cada módulo todos los mensajes de error y advertencias que se desee a partir de un fácil diagnóstico de las fallas durante la ejecución de la simulación. También en cada uno se puede realizar un análisis sobre la consistencia y realidad física de los datos que se ingresan y de los resultados obtenidos.

De lo anterior se deriva que las ventajas del enfoque modular secuencial surgen de una estructura determinada a priori para el flujo de información, la cual coincide con el flujo material en el proceso. Pero esta razón se convierte en la fuente de las desventajas de este enfoque, pues a partir de la rigidez que tiene el flujo de información en la resolución, no es posible plantear ciertos problemas, en particular la optimización que nos ocupa, sin caer en complicadas estructuras iterativas que requieren tiempos de cómputos no realistas. Resulta, por ejemplo, muy costosa la resolución de problemas de diseño en los cuales se imponen algunas especificaciones o condiciones sobre el valor de una corriente o sobre el resultado de un equipo. La primera solución para esto suele ser resolver varias veces la simulación hasta que se cumplan las condiciones. También se suele recurrir a controladores, unidades diseñadas de modo de obtener el valor prefijado, lo cual incrementa el costo de la simulación pues se requieren iteraciones adicionales para la convergencia del controlador. En otras situaciones, las menos, hay ciertos módulos orientados al diseño (bombas con presión de descarga dada, intercambiadores con la temperatura de salida fija, etc) pero no se puede hablar de versatilidad en un simulador de procesos modular secuencial.

Pasamos ahora al problema más complejo: la optimización. La evaluación de los puntos requeridos para la optimización de un proceso implica resolver repetidamente el sistema de ecuaciones que representa la planta. Se debe notar que, como estas ecuaciones están asociadas a los módulos, no es posible acomodarlas para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

favorecer la optimización. Esto lleva a que el costo de la resolución fuera, en la mayoría de los casos, prohibitivo para problemas reales hasta hace unos pocos años.

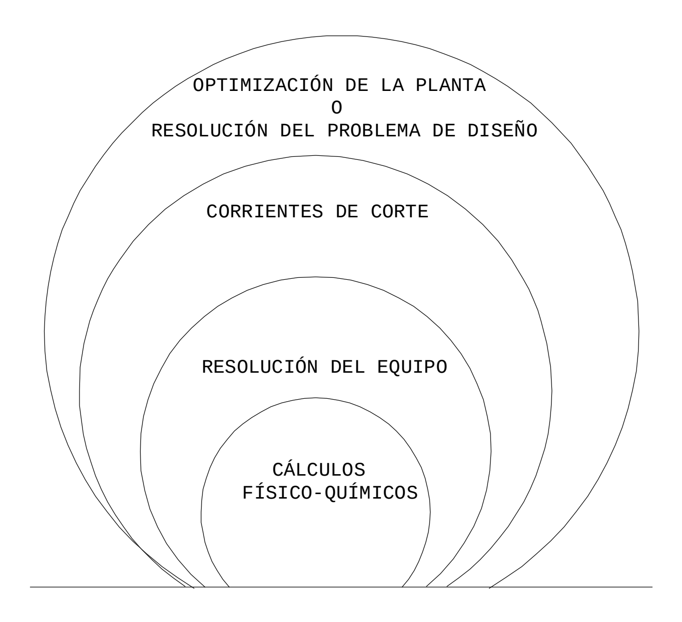


Figura XII.4

La figura XII.4 es clara al respecto: cada iteración buscando un valor determinado para una corriente de salida de la planta requiere un número de iteraciones para converger las corrientes de corte; en cada una de éstas es necesario iterar para resolver cada uno de los módulos que componen la planta, pero, a la vez, cada una de las últimas involucra procedimientos iterativos para obtener los valores de las estimaciones de las propiedades fisicoquímicas. Esta estructura es muy costosa, especialmente si es parte de una función de evaluación en un programa de optimización. Se han propuesto diversas estrategias que intentan superar las limitaciones que imponen los distintos niveles iterativos anidados en una optimización de procesos con el enfoque modular secuencial, que luego serán tratadas.

XII.3.2. Enfoque global

En el enfoque global, o también denominado orientado a las ecuaciones, se modela el proceso resumiendo todas las ecuaciones que describen la planta en un gran sistema (Shacham et al. (1982); Perkins (1983); Biegler (1983)).

La primera etapa en la resolución de una simulación con el enfoque global

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

es la generación de las ecuaciones que describen el flowsheet. En general se trabaja con una estructura modular, con una subrutina que escribe las ecuaciones para cada tipo de equipo. Muchas veces, dependiendo de la estructura del simulador, también se encarga de las derivadas correspondientes para generar el jacobiano, y de la topología de éste, o sea ubicación de los elementos distintos de cero.

Para la resolución propiamente dicha existen dos estrategias para resolver el gran sistema de ecuaciones algebraicas que ha surgido, las cuales buscan además aprovechar la estructura sumamente rala del mismo. En la primera de ellas se realiza el rasgado del sistema de ecuaciones, o sea, se selecciona un conjunto de variables de modo que proponiendo valores para las mismas, se puedan obtener todas las restantes como resultado de una secuencia de problemas en una variable. Luego se comparan los valores propuestos y los calculados, y se busca la convergencia mediante algún método numérico. Si se quiere, es similar a la convergencia del enfoque modular secuencial sólo que el procedimiento no se realiza sobre todas las variables de ciertas corrientes, sino sobre variables que pueden ser seleccionadas sin ninguna condición.

La otra estrategia que es además la más utilizada, es la de aproximaciones lineales, en la cual se itera sobre todas las variables usando el método de Newton Raphson o algún derivado del mismo.

En el caso del enfoque global, y teniendo presente la ecuación (1), no está predeterminado a priori qué variables están en x y cuáles en u. De esto se deriva la principal ventaja de este enfoque, que es la posibilidad de resolver los problemas de diseño y optimización sin recurrir a estructuras complicadas o forzadas. En el caso de especificaciones de diseño, éstas se incluyen en el sistema de ecuaciones. Además, en el caso de un problema de optimización, el problema puede ser planteado directamente en este formato. Las ecuaciones que modelan el proceso son incluidas como las restricciones del problema, sin ninguna consideración adicional a cómo son resueltas. Esto queda a cargo de la estrategia adoptada para la optimización. Queda claro que la optimización se trata sin ningún condicionamiento sobre como se deben resolver las ecuaciones como ocurría en el enfoque modular secuencial. Así, por ejemplo, no está determinado a priori qué se debe dar como dato, sino que por el contrario, cualquier conjunto de variables que cubra adecuadamente los grados de libertad del sistema puede ser la información suministrada al simulador. Además, en los casos en que el problema está correctamente formulado e inicializado, la resolución de la simulación es más rápida, y esta característica es aún más destacada para la convergencia de una optimización.

Al ganar en flexibilidad en el planteo del problema se pierde robustez, confiabilidad y eficiencia. Al resolver el sistema de ecuaciones, si se produce un error, alternativa muy posible en las primeras etapas, es muy complejo determinar la causa y corregir los elementos necesarios para superarlo. Resulta muy difícil también realizar diagnósticos y análisis de consistencia pues el procedimiento de resolución no guarda ninguna referencia respecto a qué módulo pertenece cada una de las

ecuaciones que trata, y menos aún entre qué valores puede variar una solución correcta desde el punto de vista físico-químico. Además, al utilizar métodos del tipo Newton-Raphson o derivados, es necesario dar valores iniciales para todas las variables del sistema, lo cual, dada la dimensión que enseguida adquieren los sistemas, resulta realmente complicado, pese a que se conozca con profundidad el proceso. Existen simuladores que generan automáticamente esta inicialización, aunque esto no impide que surjan problemas en la convergencia del sistema.

En general, los simuladores que corresponden a este tipo de enfoque, a partir de las ventajas y desventajas citadas, no tienen un importante desarrollo. Realmente cuesta imaginar la resolución global de una planta, incluyendo varias torres resueltas de manera rigurosa. Sin embargo, para problemas de cierta dimensión y más para un caso de optimización, puede resultar una alternativa sumamente ventajosa. Se debe notar finalmente que el desarrollo de un simulador global es una tarea más ardua ante la imposibilidad de desarrollar cada módulo por separado como en el enfoque modular secuencial.

XII.3.3. Enfoque modular simultáneo.

Tratando de aprovechar las ventajas de los dos enfoques ya citados, y de superar sus desventajas, un tercer enfoque ha surgido: el modular simultáneo. El objetivo del mismo es aprovechar los robustos módulos del método modular secuencial, unidos al mejor planteo de los problemas de diseño y optimización, y la mayor velocidad de convergencia del enfoque global. Algunos no ven en este enfoque un nuevo método, sino que por el contrario lo consideran un caso particular de los dos anteriores. Por ejemplo Pierucci et al. (1982), hablan de promover la convergencia del enfoque modular secuencial usando lo que denominan modelos evolucionarios. Por su parte Perkins (1983) habla del enfoque modular simultáneo como un caso particular del global. Para ello se afirma en que el método de Newton-Raphson utilizado para la resolución genera una aproximación lineal, y que el modular simultáneo, con la misma idea, plantea aproximaciones más realistas basadas en modelos físicos. Además las ecuaciones del modular secuencial deberían ser usadas para generar el modelo global, y ciertos procedimientos incorporados en su resolución.

Más allá de estos híbridos esquemas, la base del enfoque modular simultáneo se basa en el uso alternativo de modelos rigurosos y aproximados. Se recorre en primer lugar la secuencia de resolución del enfoque modular secuencial proponiendo valores para las corrientes de corte, y las alimentaciones y los parámetros de equipo si fuera necesario. A partir de los valores obtenidos para todas las corrientes luego de esta pasada por todos los equipos de la planta, se generan los modelos aproximados de todas las unidades. Estos se reúnen en un gran sistema y se resuelven de acuerdo al enfoque global. Con los resultados obtenidos se pueden proponer nuevos valores para las corrientes de corte, alimentaciones y los parámetros de los equipos y se

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

vuelve a iterar sobre la secuencia de resolución. Este procedimiento se repite hasta alcanzar la convergencia.

Una etapa clave en este enfoque es la generación de los modelos aproximados de los equipos, los cuales pueden ser lineales o no lineales. En el primer caso es más rápida la convergencia del modelo lineal aproximado, pero se requiere un mayor número de iteraciones para la convergencia del método en si. En el otro caso la convergencia total del sistema requiere menor número de iteraciones, pero cada una de ellas demanda más tiempo. Influye también en este caso la manera en que se generan los modelos aproximados: mediante modelos analíticos reducidos (Jirapongphan (1980), Pierucci et al. (1982)), o a través de perturbaciones numéricas.

Con este enfoque se pueden plantear problemas de diseño y optimización para lo cual hay que incorporar en el modelo global las ecuaciones, y la función objetivo si correspondiera. La solución de este problema, en cuanto a valores de corrientes y parámetros de equipos son cargados para la resolución del modelo riguroso de la planta. De este modo se resuelven simultáneamente la convergencia de las corrientes de corte y el problema de diseño u optimización que se hubiera agregado.

Siguiendo la estrategia de usar alternadamente modelos simples y rigurosos, se tiene una serie de ventajas. En principio, se utilizan los eficientes programas del enfoque modular secuencial, con los cuales se pueden detectar y diagnosticar fácilmente los errores, realizar chequeos de consistencia y sobre todo realizar cálculos de alta complejidad. Además estos generan adecuados valores iniciales para el modelo global.

XII.4. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SECUENCIAL

Se han utilizado distintas estrategias para la optimización de procesos con el enfoque modular secuencial. Estas se pueden clasificar en:

- Métodos de caja negra.
- Métodos de camino factible.
- Métodos de camino no factible.
- Métodos híbridos.
- Métodos siguiendo el flujo lógico de información.

Analizaremos estas metodologías con detenimiento dado que en general se trabaja con este enfoque. Más allá de los programas comerciales, la aplicación práctica, por la misma idea de trabajar con operaciones, lleva al desarrollo de módulos que son probados, ajustados y testeada su consistencia. Sin duda que el paso final es su utilización en algún problema de optimización por lo que el empleo de alguna de estas metodologías resulta inmediata.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Además, en general, la utilización de un simulador de este tipo para optimización exige pocas modificaciones: en algunos casos se reemplaza el módulo de convergencia habitual por otro que contemple la optimización, y en otros casos se genera un nuevo módulo externo que "dirige" al simulador. En ambos casos se mantiene la modularidad y las ventajas que la misma conlleva.

XII.4.1. Métodos de caja negra

Fueron los primeros en ser utilizados, a partir de su simplicidad y fácil implementación, aunque su performance es muy pobre. Su nombre deriva del hecho que el simulador es considerado como una caja negra, sin ningún acceso a sus ecuaciones. El optimizador funciona como un módulo exterior, conformando un nuevo nivel iterativo, que por alguna metodología propone distintos puntos sin utilizar ninguna información sobre el proceso para generar nuevos valores para las variables de decisión. El simulador, por su parte, se encarga de evaluar cada uno de ellos. La figura XII.5, de algún modo una nueva versión de la figura XII.4, muestra la estructura básica del problema. Existe una separación entre la simulación y la optimización. Desde el punto de vista de las ecuaciones, por un lado se tiene:

(P.2)

$$\begin{aligned} & Min\ f\ (x,\ y,\ u) \\ & sujeto\ a \\ & g\ (x,\ y,\ u)\ \leq\ 0 \\ & c\ (x,\ y,\ u)\ =\ 0 \end{aligned} \qquad \mathbf{(7)}$$

y por el otro las ecuaciones (1). (7) se resuelve por algún algoritmo adecuado de acuerdo a la estructura del problema, con la dificultad que la evaluación de cada punto para calcular las distintas funciones implica resolver (1). Normalmente (7) es un problema muy simple, en algunos casos suele ser sin restricciones salvo las cotas para las variables operativas, en el cual se liberan algunas variables que en (1) están fijas en u. La resolución de (7) no tiene dificultades desde el punto de vista matemático del problema de optimización, pero sí demanda tiempos realmente importantes de resolución, y de ahí que se use para casos muy simples, pues para el resto es realmente inaplicable. Siguiendo el esquema de la figura XII.5 se advierte que para cada punto que se propone, el simulador debe realizar la convergencia de las corrientes de corte. Dos de los pocos parámetros sobre los que se puede trabajar en la resolución son los valores iniciales de las corrientes de corte para cada punto propuesto y el error de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

convergencia de las mismas, con alguna estrategia que varíe dicho valor según la proximidad al óptimo.

En cuanto a los métodos de resolución utilizados, cualquier método que requiera el cálculo de gradientes demanda mucho tiempo para su cálculo, ya que se debe converger el problema para cada perturbación numérica. En general se trabaja con métodos que responden a patrones de búsqueda. Por ejemplo Friedman y Pinder (1972), en un trabajo pionero en el cual aúnan los resultados alcanzados hasta ese momento en simulación y optimización, utilizan tres métodos. En primer lugar usaron el método simplex, que no se debe confundir con el que se utiliza para programación lineal (realmente no fueron muy ingeniosos para elegir el nombre). Este método trabaja con un patrón de búsqueda que es un poliedro de n+1 vértices, donde n es el número de variables de decisión del problema. La función objetivo es evaluada en cada vértice y aquel en el cual se obtiene el peor valor es rechazado y reemplazado por uno nuevo que se genera a partir de los restantes puntos en una dirección opuesta a donde estaba el punto rechazado. Este poliedro se expande y contrae durante la aplicación del algoritmo a fin de mejorar la velocidad de convergencia y de afinar la búsqueda del óptimo en las iteraciones finales.

Otro método utilizado fue el de Hooke and Jeeves basado en dos tipos de movimientos. Por un lado búsquedas exploratorias a lo largo de cada uno de los ejes coordenados a partir de un punto base. Luego de estos movimientos queda determinado un nuevo punto, que unido al punto base inicial determina una línea a lo largo de la cual se realiza el segundo tipo de búsqueda, que como resultado da un nuevo punto base para la próxima iteración.

Los métodos anteriores, pese a tratarse de métodos para problemas multivariables sin restricciones, son combinados con algún tipo de lógica para manejar las restricciones, de modo de proponer puntos que las satisfagan. Es preciso tener en cuenta que habitualmente se trabaja en esta estrategia con problemas con muy pocas restricciones, muchas veces sólo cotas sobre las variables.

Finalmente Friedman y Pinder (1972) utilizan el método de Davidon, Fletcher y Powell (Reklaitis y otros, 1983) en el cual se elige una dirección de búsqueda actualizando una aproximación de la matriz inversa de las derivadas segundas o hessiana en el mínimo.

Dentro de las distintas opciones en cuanto a los métodos de optimización, otro que ha sido usado es la búsqueda aleatoria adaptable (Ballman y Gaddy, 1977; Gaines y Gaddy, 1976). Se basa en generar una dirección de búsqueda a partir de muestreo, y la longitud de paso en esa dirección queda determinada a partir de la historia previa de éxitos y fracasos. Específicamente, si dos pasos sucesivos condujeron a mejoras, la longitud del paso se incrementa. Por el contrario, si dos pasos sucesivos no conducen a mejora se reduce la medida del paso.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

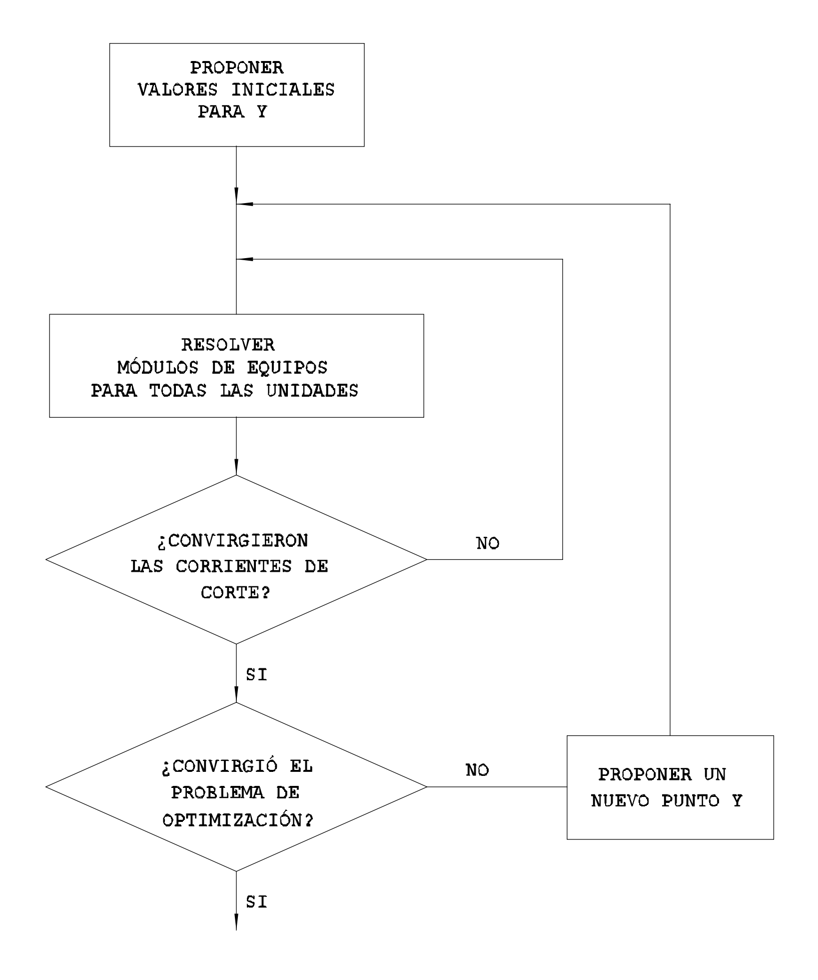


Figura XII.5

Como se señaló al comienzo, la eficiencia de los métodos de caja negra es muy limitada. Una medida usual para evaluar la performance de una optimización es el equivalente de tiempo de simulación (ETS), que se determina como el cociente entre el tiempo total requerido para la optimización y el tiempo que demanda la convergencia de la simulación desde el mismo punto inicial. En el caso de la estrategia de caja negra que estamos analizando se habla de al menos 100 ETS,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

(Ballman y Gaddy, 1977), lo cual obviamente impide su aplicación a problemas de gran dimensión. Es interesante tener presente que en este tipo de evaluaciones hay una serie de factores que influyen (punto inicial, error de convergencia, parámetros del método de optimización, etc) y que han sido adecuadamente ajustados. Probablemente en un caso real nos encontramos con tiempos aún mayores.

Más allá de los largos tiempos de resolución requeridos, este tipo de estrategia presenta otro tipo de inconveniente que hay que considerar. Es posible que los puntos propuestos no correspondan a una solución factible del proceso, por lo que el simulador fracasará en su intento de resolver el problema. La devolución de resultados sin sentido, o directamente una parada en la simulación, deben ser apropiadamente contemplados por el optimizador para proponer nuevos puntos.

XII4.2. Métodos de camino no factible

Tal como se señaló en el punto anterior, los métodos de caja negra son de fácil implementación: ni siquiera hay que hacerle alguna modificación al simulador para poder aplicarlo. Si se quiere este tipo de estrategia es razonable, pues la mayor restricción de la simulación con el enfoque modular secuencial es la rígida estructura del flujo de información, atada al flujo de materia en el proceso. El hecho de que para la resolución se mantenga el mismo sentido que tienen las corrientes de la planta, y que éstas además se manejen como una unidad, es una exigente condición cuando se quieren plantear problemas con cierta flexibilidad (Montagna, 1987). Por lo tanto, las posibilidades del optimizador de trabajar sobre la estructura del simulador son muy limitadas: debe atenerse a los módulos disponibles con su correspondiente flujo de información.

Si bien en un principio se estableció el (P1) en el cual se agregaban las ecuaciones (1) que modelaban el proceso al problema de optimización (2)-(5), partiendo de la base que se está trabajando con el enfoque modular secuencial esto debe ser adecuadamente revisado. (1) es un gran sistema de ecuaciones con, en un caso general, varios miles de ecuaciones. Sin embargo, su resolución se reduce a la convergencia de las corrientes de corte, por lo cual ese mismo sistema puede plantearse como (6). (6) es de una dimensión mucho menor: en el orden de 10 a 20 ecuaciones, una por cada variable de corte. Esta resolución se debe a que los valores z son obtenidos como una función implícita luego de resolver (1). Por lo tanto se puede replantear (P1) utilizando lo anterior:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

(P3)

$$Min\ f\ (x,\ y,\ u)$$

sujeto a

$$h\ (x,\ y,\ u):\ z\ -\ w\ (x,\ y,\ z,\ u)\ =\ 0 \qquad \textbf{(8)}$$

$$g\ (x,\ y,\ u)\ \leq\ 0$$

$$c\ (x,\ y,\ u)\ =\ 0$$

La diferencia en dimensión de (1) y (8) es tremenda: mientras (1) por su magnitud no podía ser tratado como un solo problema (por lo que hubo que descomponerlo en el enfoque de caja negra), ahora se trata de un problema de una dimensión razonable que puede ser tratado con cualquier algoritmo que manipule restricciones de igualdad no lineales sin exigir su convergencia para cada evaluación de las funciones.

Avancemos un poco más en las implicancias del planteo de (P3). El problema de optimización y de simulación se resuelven simultáneamente. Las condiciones que exigen la convergencia de la simulación son incorporadas a la optimización, por lo que en el óptimo, el cumplimiento de estas restricciones aseguran la convergencia de la simulación. Resolviendo la optimización se está hallando al mismo tiempo la solución de la simulación (figura XII.6).

Una cuestión que queda pendiente, si aún no fue intuida, es el motivo del nombre de este método. Se denomina de camino no factible pues en todas las iteraciones, salvo en la última no se requiere el cumplimiento de las restricciones h (x, y, u) = 0. Por lo tanto todos los puntos correspondientes a soluciones intermedias son en general no factibles, o sea no resuelven el modelo del proceso. Recién en el óptimo, el punto obtenido es factible.

Lo anterior es, de algún modo, una dificultad del método descripto. En caso de algún error intermedio y de detención de la resolución, no se cuenta con ninguna solución, que si bien no sería óptima, fuera al menos factible. En este punto hay una ventaja a favor de los métodos de caja negra: salvo en la primera iteración, cuando se produce un error, siempre se cuenta con una solución al menos factible. Por el contrario, como se verá luego, hay grandes diferencias en la velocidad de resolución a favor de los métodos de camino no factible.

Ya se había señalado que en el enfoque modular secuencial no se puede avanzar mucho sobre la estructura de resolución, y por ende del simulador. En el caso

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de los métodos de camino no factible sólo se modifica el módulo de convergencia. Este es reemplazado por uno que resuelve (P3) y ocupa la misma posición en la secuencia de resolución. El resto de la estructura del simulador permanece sin cambios, incluyendo la determinación de las corrientes de corte y la secuencia de resolución.

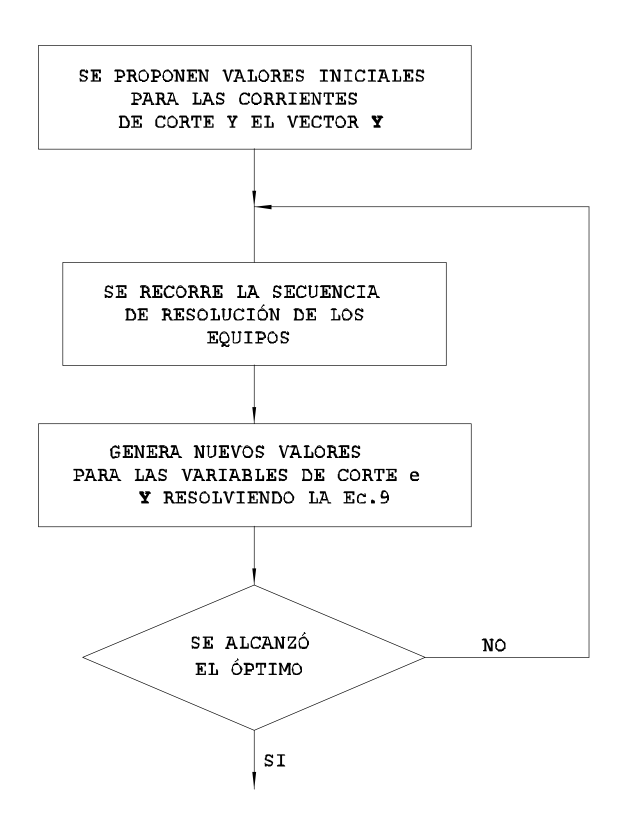


Figura XII.6: Diagrama de bloques de la optimización de procesos por un método de camino no factible.

Los métodos de camino no factible han sido tratados principalmente por Biegler y colaboradores (Biegler y Hughes (1982), Biegler (1985), Biegler y Cuthrell (1985), Lang y Biegler (1987), etc), quienes perfeccionaron esta estrategia, fundamentalmente el algoritmo de optimización utilizado.

Para resolver la optimización el algoritmo habitualmente usado es el de Programación Cuadrática Sucesiva, más conocido por SQP por sus siglas en inglés

(Han (1977), Powell (1978)). Este método en cada iteración minimiza una aproximación cuadrática de la función objetivo, linealizando las restricciones del problema. Se obtiene entonces un programa cuadrático para lo cual se utiliza nada más que información de evaluaciones de las funciones involucradas y de sus gradientes, ya que la matriz hessiana es actualizada mediante expresiones cuasi-Newton que evitan el cálculo de derivadas de un orden mayor. De lo anterior se deriva que en este método una de las actividades que más tiempo consume y que más se ha analizado es el cálculo de los gradientes.

En cada iteración i el método SQP resuelve un problema de la siguiente forma, que es una aproximación de (P3):

(P4)

$$\underset{d}{Min} \ \nabla f\ (y_i,\ z_i)^T\ d\ +\ \frac{1}{2}\ d^T\ B\ d$$

$$sujeto\ \ a$$

$$h(y_i,\ z_i)\ +\ \nabla h(y_i,\ z_i)^T\ .\ d\ =\ 0$$

$$g(y_i,\ z_i)\ +\ \nabla g(y_i,\ z_i)^T\ d\ \leq 0 \qquad \textbf{(9)}$$

$$c(y_i,\ z_i)\ +\ \nabla c(y_i,\ z_i)^T\ d\ =\ 0$$

$$\begin{bmatrix} y_i^{\,l} \\ z_i^{\,l} \end{bmatrix} \leq \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + d \leq \begin{bmatrix} y_i^{\,u} \\ z_i^{\,u} \end{bmatrix}$$

En (P4) se han tenido en cuenta sólo las variables del problema de optimización. El subíndice refiere a la iteración, mientras que los supraíndices l y u hacen referencia a las cotas inferiores y superiores. B es una aproximación de la matriz hessiana que se calcula mediante la fórmula BFGS, a partir de actualizaciones cuasi-Newton (Dennis y Moré (1977)).

Resolviendo el problema cuadrático (P4) se tiene una dirección de búsqueda d. El próximo paso es una búsqueda univariable a lo largo de esta dirección d, que minimiza una función de penalidad que de algún modo mide la mejora en la función objetivo y la infactibilidad de las restricciones. Un ejemplo de función de penalidad es:

$$P(y,\ z) = f(y,\ z) + \sum_j t_j \max\ [0,\ g_j(y,\ z)] + \sum_k s_k\ |h_k(y,\ z)| + \sum_r s_r\ |C_r(y,\ z)| \qquad \textbf{(10)}$$

donde t_j, s_k y s_r son factores de peso determinados a partir de los resultados del P4. En la iteración i:

$$t_j^{\,i} = \min\ [t_j^{\,i-1},\ ½\ (u_j + t_j^{\,i-1})]$$

$$s_k^{\,i} = \min\ [s_k^{\,i-1},\ ½\ (v_k + s_k^{\,i-1})] \qquad \textbf{(11)}$$

$$s_r^{\,i} = \min\ [s_r^{\,i-1},\ ½\ (v_r + s_r^{\,i-1})]$$

donde u_j, v_k y v_r son los múltiplicadores de Kuhn-Tucker obtenidos en la solución de (P4).

Los puntos indicados son evaluados a lo largo de d, a partir del punto inicial de la iteración i:

$$\begin{bmatrix} y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \lambda\ d \qquad \textbf{(12)}$$

Como resultado se obtiene la longitud del paso λ a lo largo de d, con lo cual el nuevo punto inicial para la iteración siguiente es:

$$\begin{bmatrix} y_{i+1} \\ z_{i+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_i \\ z_i \end{bmatrix} + \lambda\ d \qquad \textbf{(13)}$$

Luego comienza una nueva iteración a partir del punto inicial (12).

Uno de los puntos centrales en cuanto a la performance de este método está referido al cálculo de los gradientes requeridos en (9). La forma de calcularlos más

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

directa es mediante perturbaciones numéricas. Para esto es preciso tener en cuenta que una vez perturbada una variable del problema de optimización no es preciso resolver de nuevo todos los equipos de la secuencia de cálculo, sino sólo desde donde afecta la variable perturbada hasta el final de la secuencia de cálculo. Esto se realiza para las variables de las corrientes de corte z y para las variables de decisión del problema de optimización y preserva la estructura de módulos "caja negra" del enfoque modular secuencial. Otra alternativa para el cálculo de los gradientes es la inclusión en cada módulo de los gradientes analíticos, lo cual obliga a analizar todas las posibles relaciones entre funciones y variables. De algún modo una completa especificación de los gradientes tiende a destruir la idea de que cada módulo es un desarrollo independiente, que se ajusta y testea separadamente. Se requieren cambios en el sistema ejecutivo o lógica central del simulador para manipular las matrices jacobianas. A cambio de lo anterior se obtiene una performance superior, que en algunos casos ha sido estimada entre el 50% y el 70% del tiempo de cómputo requerido usando perturbación directa (Biegler, (1985)). Estos ahorros son más importantes si las variables de decisión e iteradoras se encuentran al comienzo de la secuencia de resolución. En cada caso particular se deberían pesar adecuadamente las ventajas y desventajas de ambas estrategias de cálculo de gradientes.

Otros temas vinculados a la performance de este enfoque son referidos al método SQP. Dentro de este ámbito se pueden distinguir tres temas (Biegler y Cuthrell, 1985):

1. Problema cuadrático (P4)
2. Búsqueda univariable (10)
3. Procedimiento de escalado

Los dos primeros son obvios, pero interesa destacar la importancia del tercero para una correcta convergencia. Para ello conviene aclarar la idea del escalado. Este refiere a que las magnitudes de todos los elementos del modelo a ser optimizado estén en un determinado rango. Por un lado está el escalado de las variables y por otro el de las restricciones.

En un caso ideal todas las varibales deberían estar en un cierto rango para asegurar que los vectores de búsqueda tomen valores razonables. Si alguna variable no cumple con esta condición se la reemplaza por una nueva variable, que es igual a la anterior multiplicada por una constante apropiada, de modo que quede bien escalada. De igual modo se trabaja con las restricciones. Se puede analizar la sensibilidad de las restricciones con respecto a cambios en las variables. Además se pueden revisar los gradientes. Es conveniente que todas las restricciones tengan una sensibilidad similar a cambios en los valores de las variables y que los gradientes de las restricciones caigan en el mismo rango de valores. Esto permitirá considerar de igual modo las violaciones de las restricciones y evitar problemas numéricos. Para

superar los inconvenientes que pudieran surgir se multiplican las restricicones por constantes adecuadas.

Una dificultad que presenta es que no existe un procedimiento general, y que por el contrario se advierte una alta dependencia con el problema. Por ejemplo una recomendación es que los valores absolutos de los gradientes sean escalados de modo de obtener valores entre 10 y 100. Pero también existen otras que sobre diferentes ejemplos andan mejor. De todos modos se trata de un tema que debe ser considerado con atención en cualquier implementación. Las aproximaciones de la matriz hessiana, los cálculos de gradientes aproximados y los errores de redondeo pueden conducir al fracaso si no se escala adecuadamente el problema.

XII.4.3. Métodos de camino factible

La presentación de los métodos de camino factible se simplifica a partir de los anteriores. Partamos de la base que al igual que en los métodos de camino no factible, no se realiza una descomposición absoluta entre el problema de optimización y el de simulación. Por el contrario, también se incorporan al problema de optimización las restricciones de igualdad que exigen la convergencia de las corrientes de corte. Se tiene entonces el problema (P3), con las mismas consideraciones que se hicieron en el punto anterior.

Básicamente estos métodos reciben el nombre de camino factible basados en que en cada iteración se convergen las corrientes de corte, o sea se cumplen las restricciones $h(x, y, u) = 0$. Se podría pensar que es lo mismo que los métodos de caja negra. La diferencia estriba en que en estos métodos de camino factible no hay una disociación entre los problemas de simulación y optimización. Por el contrario, en el método iterativo empleado para la proposición de nuevos puntos se tiene en cuenta la información de los resultados de la simulación a través de los valores de las corrientes de corte (figura XII.7).

Existen dos métodos principales: la variante factible completa (VFC) y la variante factible reducida (VFR), ambas debidas a Biegler y Hughes (1985). En ambas se comienza iterando sobre todo el flowsheet hasta alcanzar la convergencia de las corrientes de corte. Ambos utilizan el método de Programación Cuadrática Sucesiva. La diferencia radica en que en la VFC se incluyen en la aproximación cuadrática de (P3) las variables y y z, manteniendo la misma notación que en el punto anterior. Claramente se obtiene de nuevo (P4). Esto implica que en las sucesivas iteraciones se propondrán nuevos valores iniciales para las variables de diseño y, y para las de corte z. Siempre se debe tener presente que el número de restricciones de h (convergencia de las corrientes de corte) en este planteo es sensiblemente menor al número de ecuaciones que modelan el proceso. En la VFR, se obtienen sólo los gradientes con respecto a y, y el programa cuadrático no incluye las restricciones h. Se trata de un problema de menor dimensión, lo cual se refleja en d: para la VFC tiene una dimensión $n+m$, donde n es el número de variables de diseño y m el de variables de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

corte. Para la VFR tiene sólo n elementos. La VFR mantiene información respecto al proceso, partiendo de que los valores de y que se utilizan satisfacen la restricción h (x, y, u) = 0 (o mejor dicho aproximadamente igual si se tiene en cuenta el error de convergencia). Además en el cálculo de los gradientes se tiene en cuenta la dependencia respecto a las variables de corte. Por ejemplo:

$$\nabla_y \, t = \left(\frac{\delta f}{\delta y} \right) - \left(\frac{\delta f}{\delta z} \right) \left(\frac{\delta h}{\delta z} \right)^{-1} \left(\frac{\delta h}{\delta x} \right)$$

y lo mismo para los gradientes de c y g.

Respecto a la parte estructural, la adaptación de un simulador modular secuencial a este método es también muy simple y conserva su rígida estructura: directamente se programa la VFC o la VFR como módulos que se ubican en el simulador en reemplazo del habitual módulo de convergencia. Para el cálculo de los gradientes, todos los comentarios efectuados en el punto anterior son válidos, al igual que las consideraciones sobre la aplicación del SQP. Merece en este caso especial atención la determinación de los factores de perturbación, en los cuales se debe tener presente no tomar valores demasiado pequeños para evitar que los errores de convergencia de las corrientes de corte afecten la evaluación de los gradientes.

Biegler y Hughes (1985) realizan una interesante comparación entre los métodos vistos hasta ahora. Más allá que estos números no son suficientes para sacar conclusiones generales, muestran una tendencia. Sobre un ejemplo particular, usando la medida antes citada de equivalentes en tiempo de simulación (ETS), resulta que la estrategia más demandante es la de caja negra con alrededor de 200 ETS, lo cual confirma las suposiciones que se pudieron haber hecho. Las estrategias de camino factible y no factible rondan entre 20 y 40 ETS. En el caso de camino factible, la VFR muestra una performance superior a la VFC. Otra comparación (Kisala y colaboradores, 1987) brinda también valores que no permiten establecer conclusiones definitivas entre ambas estrategias, aunque presentan una resolución en el tiempo requerido de solución: entre 5 y 6 ETS.

Los trabajos señalados no muestran diferencias importantes entre los métodos de camino factible y no factible. Hay circunstancias que afectan la performance de ambos. El esfuerzo de plantear la aproximación cuadrática es similar, fundamentalmente el cálculo de los gradientes. La estrategia de camino no factible requeriría (no siempre) la resolución de un mayor número de iteraciones y por ende de problemas cuadráticos, aunque cada una de esta iteraciones sería más breve que en el caso de camino factible pues no se requiere la convergencia de la simulación. Donde sí se advierte una ventaja es en el caso de errores en la obtención de la solución: en la estrategia de camino factible siempre tenemos algún punto convergido

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

sobre el cual podemos sacar conclusiones y hacer cambios. Para camino no factible, en caso de error la información generada hasta ese punto sirve de muy poco.

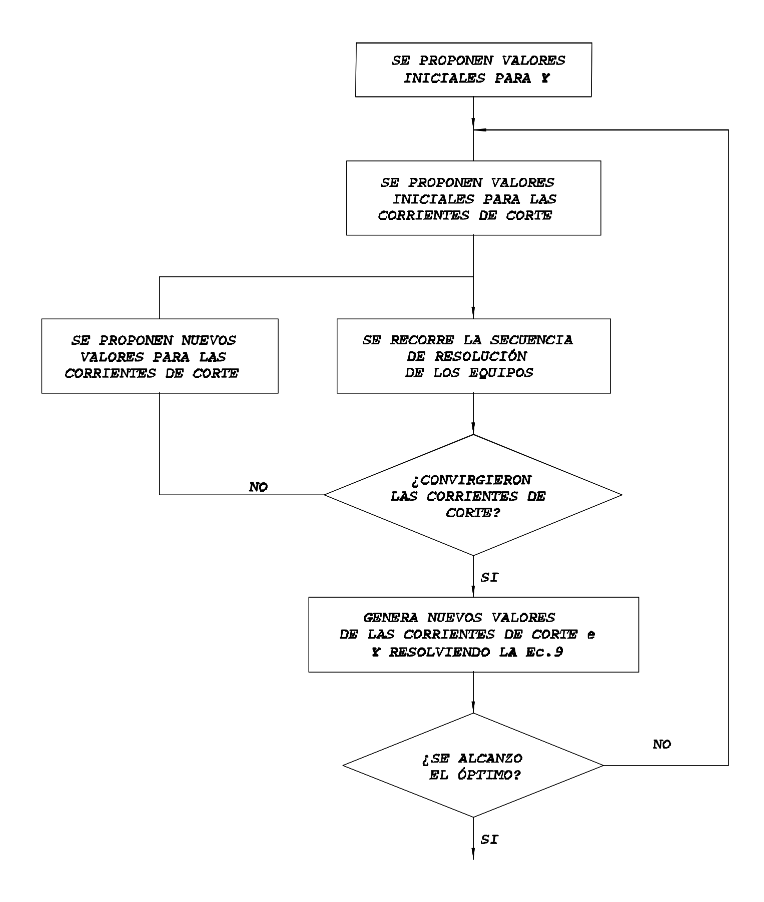


Figura XII.7: Diagrama de bloques de la optimización de procesos por un método de camino factible.

XII.4.4. Métodos híbridos

Si se analizan a fondo las estrategias de camino factible, en particular la VFC, y las de camino no factible, se las puede pensar como variantes de un mismo algoritmo. Todos los pasos son idénticos, el método de resolución, etc, salvo un detalle: el número de iteraciones que se realizan sobre la secuencia de resolución de los módulos del problema. Esto está relacionado al error exigido: mientras que en camino factible se requiere un valor muy pequeño, en camino no factible este valor no tiene ninguna condición. Como se vio previamente ambos métodos tienen sus

ventajas y desventajas.

Kisala y colaboradores (1987) presentan una alternativa que denominan método híbrido, que es una variante intermedia entre camino factible y no factible. Todos los pasos son similares a los anteriores salvo que se establece una tolerancia para la convergencia de las corrientes de corte que es un valor intermedio entre los extremos antes citados, la cual además no es fija sino que puede ajustarse durante la resolución de la optimización. Otra alternativa es ajustar el número de iteraciones sobre la secuencia de resolución.

Como resulta evidente, la implementación de esta estrategia está en las mismas condiciones que sus antecesoras, tanto a nivel de ajustes en la arquitectura del simulador, como de consideraciones a tener en cuenta sobre el método de programación cuadrática sucesiva que se usa en la resolución.

Se supone que el método híbrido tiene una superior performance que sus dos antecesores dado que no requiere la convergencia de las corrientes de corte como en la VFC. También supera algunos inconvenientes que presentaba la estrategia de camino no factible cuando se hacía la búsqueda univariable sobre la dirección d obtenida como solución de la aproximación cuadrática.

Un tema de discusión en esta metodología es referida a la tolerancia admitida en cada punto de la búsqueda univariable. Dado que en cada evaluación el error varía, se modifica la forma de la función de penalidad utilizada. Existen distintas alternativas: desde converger las corrientes de corte una vez que se ha determinado la longitud del paso en lugar de hacerlo en todos los puntos, hasta exigir que en cada punto se realice la convergencia de las corrientes de corte a una tolerancia previamente determinada, con lo cual se torna despreciable el aporte de los errores en la convergencia de las corrientes de corte a la función de penalidad. También aquí hay variantes según sea la exigencia en la tolerancia de la convergencia de las corrientes de corte.

En cuanto a la performance de esta estrategia, sus autores presentan una leve mejora frente a las dos previas, aunque no son diferencias significativas como para establecer conclusiones definitivas. Se presentan tiempos de resolución de alrededor de 4 ETS para el mismo caso citado al final de 4.3.

XII.4.5. Métodos siguiendo el flujo lógico de información

La rígida formulación de los problemas del enfoque modular secuencial da lugar a una serie de desventajas surgidas a raíz de la estructura iterativa anidada requerida como muestra la figura XII.4. Esto obliga a un importante esfuerzo para su resolución.

Una forma de superar las dificultades del enfoque modular secuencial, reteniendo al mismo tiempo sus ventajas, es eliminar las restricciones que exigen que las corrientes tengan en la resolución la misma dirección que físicamente tienen en el proceso. Se plantean entonces dos conceptos: por un lado está el Diagrama de Flujo Material de Información (DFMI) en el cual los arcos tienen la misma dirección que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

las corrientes de materiales, o sea el habitual flowsheet. Por otro lado tenemos el Diagrama de Flujo Lógico de Información (DFLI) que corresponde a un grafo en el cual se le asigna un sentido a sus arcos de modo de facilitar la resolución, aprovechando la información disponible (Montagna, 1987).

El algoritmo Secuencia Lógica de Resolución (SLR) permite encontrar las direcciones para los arcos en el DFLI resolviendo un programa lineal entero que asegura que cada unidad pueda ser resuelta y toma en cuenta cualquier restricción adicional que surja a partir del conocimiento que tiene el ingeniero sobre el modo de reducir la estructura iterativa del problema (Montagna e Iribarren, 1988). La aplicación de este algoritmo a un proceso de síntesis de amoníaco (Kisala y colaboradores, 1987) que muestra la figura XII.8 permite pasar de un DFMI con una corriente de corte a un DFLI acíclico.

La implementación de la resolución sobre el DFLI requiere la incorporación de nuevos programas a la biblioteca de módulos. Estos contemplan nuevas opciones sobre el DFLI, en las cuales los grados de libertad son cubiertos no sólo por las corrientes de entrada al equipo sino también por cualquier conjunto de corrientes que sea matemáticamente factible. En general, trabajando sobre el DFMI pueden existir distintas opciones de un equipo utilizando diferentes conjuntos de parámetros, pero las corrientes de entrada a la unidad siempre son datos. Trabajando sobre el DFLI el conjunto de corrientes que son dato puede variar dependiendo de las direcciones asignadas en la configuración final obtenida luego de aplicar el algoritmo SLR. Se tienen, por lo tanto, diferentes estructuras matemáticas del sistema de ecuaciones si se cubren los grados de libertad de otra manera. Esto obliga a cambiar el método de resolución, que posiblemente tenga otra performance. Montagna (1993) concluye que hay casos muy disímiles. Por ejemplo en el caso de sumadores, divisores, bombas e intercambiadores de calor, las resoluciones sobre el DFMI y sobre el DFLI son similares, como fácilmente se puede derivar analizando los modelos correspondientes. Esto no sucede con otros equipos. Algunos módulos nuevos sobre el DFLI pueden presentar una performance superior a los tradicionales, pero esto no siempre es cierto. En el caso de una columna de destilación se pasa de un tiempo de cómputo de 6,17 segundos de CPU sobre el DFMI a 2,40 segundos sobre el DFLI. Otros casos muestran reducciones similares en el tiempo, además de un menor requerimiento de recursos computacionales.

Si se aplica la estrategia descripta a problemas de optimización se pueden obtener interesantes resultados en muchos casos. En principio, si se utiliza el algoritmo SLR se obtendrá una estructura del DFLI con un menor número de corrientes de corte que en el DFMI, lo cual reducirá la dimensión del problema de optimización. Además, aplicando adecuadamente el algoritmo SLR es posible establecer que condiciones sobre determinadas corrientes sean datos del problema, y no que se manejen como restricciones. Esto permite eliminar restricciones y reducir la estructura del modelo de optimización. Todo esto normalmente redundará en la reducción en el tiempo de cómputo requerido y posibilitará el tratamiento de

problemas más complejos. Además, la configuración obtenida para el DFLI es independiente de la estrategia de optimización que se adopte, sea factible, no factible o algún método híbrido. De todos modos hay que señalar la dependencia de este enfoque del caso particular que se trate y la disponibilidad para el mismo de módulos orientados al problema testeados y confiables.

XII.5. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE GLOBAL

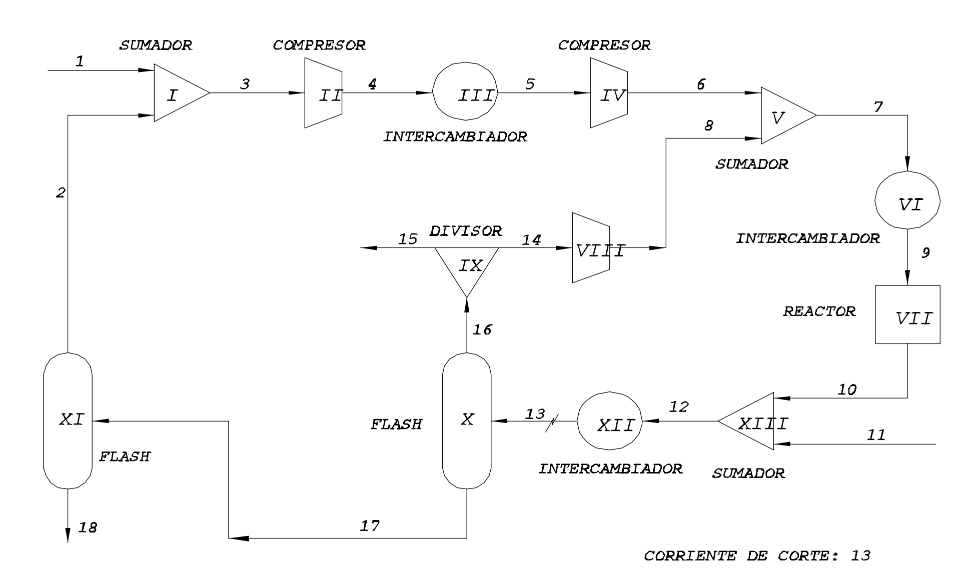
Tal como se señaló en el punto XII.3.2 el enfoque global surge como respuesta a las limitaciones de la estrategia modular secuencial para tratar problemas de diseño y optimización, fundamentalmente a la necesidad de resolver repetidas veces la simulación, con la alta demanda en tiempo de cómputo que esto implica.

Un primer uso del enfoque global u orientado a las ecuaciones es utilizando modelos lineales para representar el proceso. Cada unidad es modelada a través de una matriz de transformación que convierte la corriente de entrada a las corrientes de salida. Un tratamiento especial se da al sumador (Agarwall et al. (1978), Sood et al. (1979)). El rango de la matriz de coeficientes puede ser fácilmente chequeado para ver si el problema está bien planteado, o es consistente. Obviamente que el esfuerzo computacional requerido para resolver el problema es muy bajo. El planteo de problemas de diseño y optimización es simple y se alcanza la solución óptima de manera simple. En algunos casos se han incluido algunas restricciones no lineales para representar ciertas especificaciones (Sood y Reklaitis, 1979).

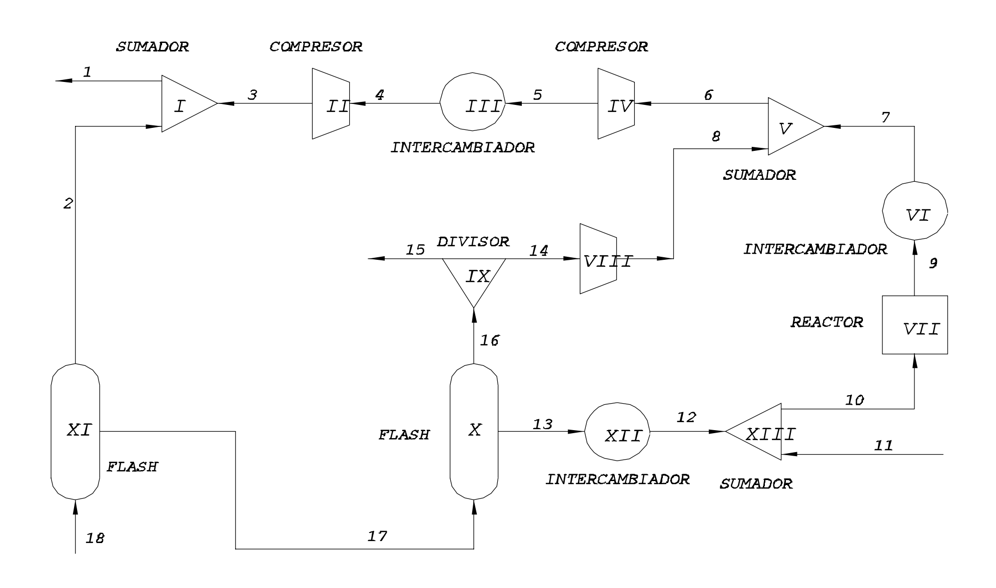
El planteo de problemas lineales fue abandonado, en general, por sus limitaciones para modelar el proceso. Sirvió como base a otras estrategias que, a partir de modelos no lineales del proceso, generaban aproximaciones lineales para obtener una estimación de la solución del problema no lineal. Fue el primer paso para la resolución global de plantas completas. Merece citarse como un caso aparte, pues muchas de sus características no concuerdan con las de los casos habituales de utilización de este enfoque, cuando se recurre a ecuaciones no lineales.

En general, la generación del modelo de optimización del proceso se sigue haciendo usando módulos. Cada uno incorpora las ecuaciones correspondientes, y en muchos casos hace lo propio con los gradientes. En ciertos casos se utiliza también manipulación algebraica automática para adecuar las ecuaciones a las necesidades del problema. Todas las ecuaciones son ensambladas en un gran sistema. No existen limitaciones, cuando se construye este sistema para ver a ciertas variables como entradas o salidas. El ingeniero puede seleccionar aquellas variables que desea especificar, y plantear una función objetivo y restricciones sin afectar la estructura de la resolución. Es en este punto donde se advierte una de las principales ventajas de este enfoque con respecto al anterior: la libertad para configurar su modelo sin que estas decisiones afecten significativamente la resolución.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999



a) DFMI



b) DFLI

Figura XII.8: Proceso de síntesis de amoníaco.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Una vez planteado el problema se tiene un modelo no lineal, para el que pueden usarse distintos algoritmos. Se puede afirmar que se ha perdido la relación con el proceso y se trata de un problema estándar de programación matemática, que dificultosamente puede ser retornado a su origen, salvo cuando se finaliza la resolución a diferencia del anterior enfoque en el que siempre se guarda referencia de los módulos. Un primer inconveniente es la inicialización de las variables (normalmente varios miles) que no puede quedar a cargo del ingeniero, sino que debe ser automática. Abarca a todas las variables, incluso las internas de las unidades. En este punto se puede usar algún tipo de ejecución de módulos simples de inicialización. También se sugiere la ejecución de una simulación completa. Desde ese momento y hasta el final de la resolución, se trata de un problema matemático, con ninguna relación respecto al proceso. Si la resolución es exitosa, la solución se alcanzará más rápidamente que en otros enfoques. Si no es así, será difícil determinar la fuente de los errores, si estos se deben a inconvenientes propios del método matemático utilizado, a una mala inicialización, o a un problema mal planteado. Puede que el algoritmo haya iterado sobre valores de las variables sin ningún significado físico.

Los algoritmos que se pueden utilizar cubren un amplio espectro, según la descripción del capítulo previo. Por un lado se puede hablar de algoritmos o paquetes genéricos válidos para cualquier problema (por ejemplo Murtagh (1982) presenta el uso de MINOS) y, por otro lado, es común que para problemas particulares se desarrollen estrategias específicas que, aprovechando características del problema, permitan su resolución eficiente (por ejemplo particionando o descomponiendo a las restricciones).

Finalmente, es importante destacar que la dimensión de los problemas tratados con este enfoque es sensiblemente menor que los tratados con el previo, por un motivo muy simple: la capacidad de los métodos para resolver programas no lineales. Sin embargo, el tiempo de cómputo en aquellos que se resuelven es menor: se habla de alrededor de 3 ETS.

XII.6. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS CON EL ENFOQUE MODULAR SIMULTÁNEO.

El objetivo del enfoque modular simultáneo, como se señaló previamente, es aprovechar las ventajas del enfoque global, fundamentalmente su flexibilidad para plantear problemas de diseño y optimización, y las del enfoque secuencial modular, en cuanto a trabajar con módulos detallados, altamente confiables y consistentes, de las operaciones involucradas en el proceso. Dentro de este grupo se han incluido muchas estrategias que cuesta agruparlas bajo un esquema común, salvo por el hecho de que no caen en los dos enfoques previos.

La figura XII.9 muestra la estructura de una estrategia bajo el enfoque modular simultáneo para tratar un problema de optimización. Se trabaja con dos tipos de modelos: por un lado están los rigurosos, correspondientes a los habitualmente encontrados en un simulador modular secuencial, incluyendo su algoritmo de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

resolución. Por otro lado están los modelos simples, que corresponden a una versión aproximada de la operación. Dado este carácter, incluye menos variables y ecuaciones que el riguroso, aunque siempre tiene en cuenta a las correspondientes a las corrientes de entrada y salida y a las de diseño. Algunas veces se denomina reducidos a estos modelos simples. Este modelo reducido se construye a partir de una solución del modelo riguroso en un punto base a partir de la cual se determinan sus parámetros. Una condición que debe cumplir es tener idéntica solución en el punto base.

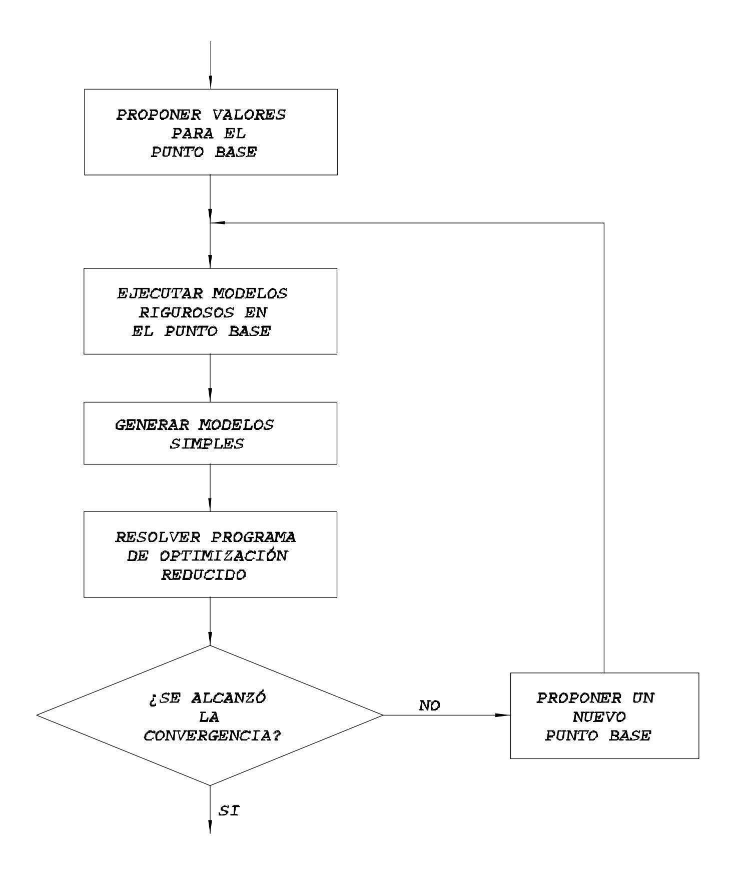


Figura XII.9

Una vez que se han generado los modelos simples para todas las unidades, se conforma un gran modelo de optimización incluyendo todas las unidades, las especificaciones de diseño y las cotas para las variables. Es preciso tener en cuenta que una de las condiciones que deben cumplir los modelos simples es que los

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

jacobianos asociados se evalúen analíticamente, sin requerir cálculos auxiliares iterativos (por ejemplo de propiedades fisicoquímicas).

Resolviendo este modelo de optimización se obtiene un nuevo punto base, a partir del cual se generarán nuevos modelos reducidos y así sucesivamente . Básicamente se distinguen dos niveles de iteración: uno externo para resolver los modelos rigurosos en los distintos puntos base, y otro interno en la resolución del programa de optimización compuesto por los modelos simples. En este último caso conviene señalar por lo dicho en el punto XII.5, que la inicialización de este programa global es muy sencilla a partir de la solución de los modelos rigurosos, y que al trabajar sobre un modelo reducido se torna ventajoso el enfoque orientado a las ecuaciones.

Las iteraciones continúan hasta que no existen modificaciones significativas en los puntos bases que se generan.

La eficiencia de los algoritmos en este enfoque depende en gran medida de los modelos reducidos que se disponga para las distintas operaciones unitarias. Estos deberían ser generados con el menor número posible de resoluciones del modelo riguroso, deberían ser tan aproximados como fuera posible sobre el mayor rango que se pueda, pero siempre manteniendo la simplicidad. Las aproximaciones lineales cumplen en parte estos objetivos, pues no presentan una buena performance. En general, los autores prefieren modelos no lineales simples generados a partir de representaciones conocidas en la ingeniería química para las operaciones unitarias. Pese a que la resolución en cada punto base puede demandar más tiempo, la performance general es superior (Jiraponghpan (1980), Pierucci (1982), Kisala et al. (1987), Chen y Stadtherr (1985)).

De la descripción anterior se advierten las ventajas de este enfoque: se siguen utilizando los módulos rigurosos, e incluso la descripción del proceso se hace en función a los mismos. Además se tienen las ventajas del enfoque global en cuanto al planteo del problema y la velocidad de resolución.

Ejemplo

Aquí analizaremos brevemente un ejemplo clásico en la literatura, para ejemplificar el uso de un simulador modular secuencial a los efectos de optimizar un proceso dado. Este caso está tomado de (Kisala y col., 1989), y a su vez fue propuesto por primera vez por Parker (1978).

El flowsheet simplificado de un proceso de síntesis de amoníaco (más detalles pueden encontrarse en Kisala (1985)) se muestra en la figura XII.10.

El objetivo para este problema (función objetivo) es maximizar el beneficio neto, calculándolo en función de rutinas de costo contenidos en un simulador modular secuencial (en el trabajo citado se ha utilizado ASPEN-PLUS).

Como puede observarse en la figura XII.10, la temperatura del reactor (que afecta la conversión y determina la energía a introducir al sistema), el nivel de presión de ambos equipos flash (que determina la proporción que se recicla sin

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

comprimir), el nivel de presión al que se comprime en la primera y segunda etapa (que se iguala a la presión de la corriente reciclada a alta presión) son variables de significativa importancia en la economía del proceso.

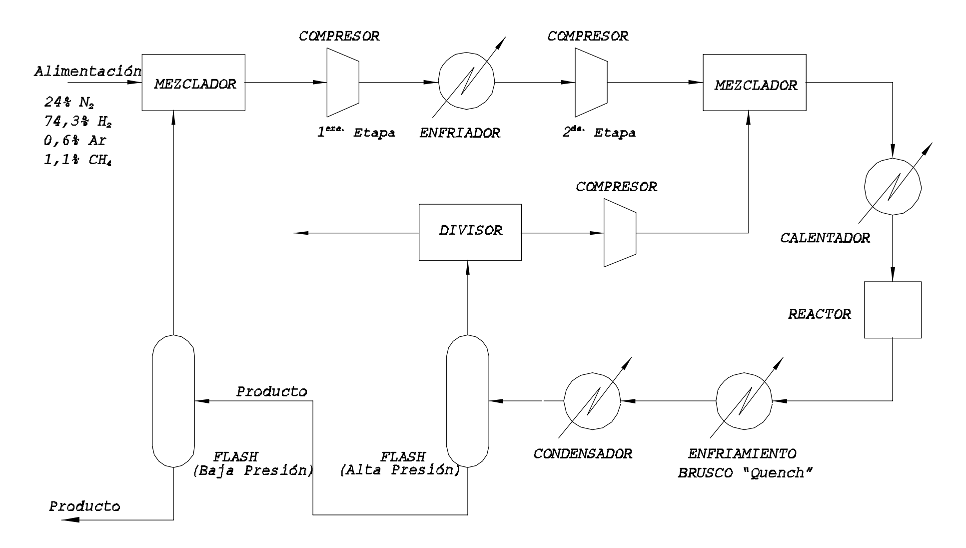


Figura XII.10:

Por otra parte, existen restricciones operativas y funcionales que deben considerarse. Por ejemplo, la cantidad de NH_3 que permitimos que se deseche en la corriente de purga, el título (fracción de vapor/líquido) admisible en los compresores, temperaturas admisibles para los materiales, la especificación del producto (composición admisible), etc. Todas estas consideraciones se traducen en una serie de restricciones de igualdad y desigualdad a acoplar a la función objetivo de costo.

En el trabajo citado se presenta una tabla destacando las variables tenidas en cuenta para la optimización, y sus respectivas cotas (mínima y máxima) permitidas, y las restricciones de igualdad y desigualdad especificadas. Vemos que todas ellas siguen los criterios expuestos en el párrafo anterior. En la tabla se indican además los valores obtenidos en el óptimo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

TABLA

Variables	Cota Mín.	Cota Máx.	Valor en el óptimo
1. Temperatura del reactor (°F)	600	1000	866
2. Presión corriente reciclo (psi)	2900	4310	2908
3. Temperatura en el precalentador (F)	400	900	400
4. Flash alta presión (presión psia)	2850	4265	2850
5. Flash baja presión (presión psia)	147	1000	147
6. Presión en el compresor (primera etapa- psia)	600	1000	600
7.Presión en el compresor (segunda etapa- psia)	2900	4310	2908
8. Temperatura en el interenfriador (°F)	100	200	200
9. Fracción de partición (divisor)	0.05	0.12	0.05
10. Temperatura del “Quench” (°F)	73	100	73
11. Temperatura del condensador (° F)	-40	140	-30.8

Restricciones de Igualdad

1. Reactor Adiabático (Q = 0).
2. La presión de la segunda etapa debe ser igual a la presión de la corriente de recirculación a alta presión.

Restricciones de Desigualdad

- El amoníaco desechado en la purga debe ser menor o igual a 2 Lb-mol/hr.
- Fracción de vapor en la corriente de entrada a la segunda etapa de compresión debe ser mayor o igual a 99%.
- La presión del flash (alta presión) debe ser al menos 4 atm. menor que la salida del compresor de la alimentación (2da. Etapa).
- La corriente producto debe contener al menos 99% de NH_3 ($X_{NH3} \geq 0.99$).

Para la solución de este problema, los autores analizaron diversos métodos tales como camino factible, camino no factible, y por último, métodos híbridos. Si bien esta última estrategia es la más conveniente, resulta interesante remarcar que se debe, en el mejor caso, evaluar el flow-sheet (simulación) 88 veces. Esto indica el consumo de tiempo de cómputo asociado al problema. Aquí vale recordar que al incorporar a un simulador modular secuencial una función objetivo definimos un problema de optimización y automáticamente activamos, además de los niveles de

optimización locales (a nivel de módulos fisicoquímicos y de equipo) y los correspondientes al DFI (corrientes iteradoras), *los referidos al problema de optimización.*

Si bien algunas estrategias de optimización evitan converger la planta completa (DFI) en cada iteración, lo cierto es que el número de evaluaciones se incrementa sustancialmente respecto a un problema de simulación clásico. Los métodos híbridos (simuladores "two-tier"), o más aún, los orientados a ecuaciones, reducen el esfuerzo de cómputo, pero en general no están disponibles en el mercado con mucha fluidez, por lo menos en el presente, siendo desarrollados para cada caso en particular.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

EJERCICIOS

1.- Plantear ejemplos de problemas de optimización sobre una misma planta que correspondan a distintas fases de su ciclo de vida.

2.- a) Plantear un modelo de optimización conceptual para el diseño de un equipo. Identificar las variables de decisión, la función objetivo, las restricciones y los parámetros del programa.

b) Analizar si es posible establecer distintos criterios de performance para el mismo problema y como quedan en cada caso la función objetivo y las restricciones.

c) Estudiar si es posible incluir simultáneamente todos estos criterios en la función objetivo. Analizar alternativas.

3.- Ídem 2 pero para el diseño de una planta completa. En este caso estudiar si es posible plantear el problema con distintos niveles de detalle, y los requerimientos de información para cada variante.

4.- Ídem 2 pero para optimizar la operación de una planta dada.

5.- Para cada uno de los problemas planteados en los puntos previos analizar las ventajas de usar los distintos enfoques vistos para la resolución, teniendo en cuenta la dimensión del problema, las características de las ecuaciones (lineales o no lineales), la necesidad de resolver repetidas veces el problema, facilidades para la inicialización, etc.

6.- Analice las dificultades de implementar un optimizador con el enfoque modular secuencial siguiendo el flujo lógico de información.

BIBLIOGRAFÍA

- Agarwall, J.C., J.V. Klumpar y F.D. Zybert; A simple material balance model; Chem. Engng. Progr., 74, p. 68 (1978).
- Ballmann, S.H. y J.L. Gaddy; Optimization of Methanol Process by Flowsheet Simulation; Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 16, p. 337 (1977).
- Biegler, L.T.; Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators. I: The Interface; Computers and Chem. Engng., 9, p. 245-256 (1985).
- Biegler, L.T.; Simultaneous Modular Simulation and Optimization, Proceedings of the Second International Conference on Foundations of Computer-Aided Process Design, Ed. A. W. Westerberg and H.H. Chien, CACHE (1983).
- Biegler, L.T. y J.E. Cuthrell; Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators. II: The Optimization Algorithm; Computers and Chem. Engng., 9, p. 257-267 (1985).
- Biegler, L.T. y R.R. Hughes; Infeasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators; AIChE J., 28, p. 994-1002 (1982).
- Biegler, L.T. y R.R. Hughes; Feasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators; Computers and Chem. Engng., 9, p. 379-394 (1985).
- Chen, H.S. y M.A. Stadtherr; A simultaneous modular approach to process flowsheeting and optimization; AIChE J., 31, p. 1843-1856 (1985).
- Dennis, J.E. y J.J. More; Quasi-Newton methods, motivation and theory; SIAM Rev., 19, p. 46-899 (1977).
- Doering, J.F. y J.L.Gaddy; Optimal Process Availability with Flowsheet Simulation; Trabajo presentado en el 83° National Meeting of AIChE, Houston (1977).
- Evans, L.B.; “Advances in Process Flowsheeting Systems”, Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, Editado por R.S.H. Mah y W.D. Seider, Engineering Foundation, Nueva York, p. 425-469 (1981).
- Friedman P. y K.L. Pinder; Optimization of a Simulation Model of a Chemical Plant; Ind. Eng. Chem. Process Des. Develop., 11, p. 512 (1972).
- Gaines, L.D. y J.L. Gaddy; Process Optimization by Flow Sheet Simulation; Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev., 15, p. 207 (1976).
- Gallier, P.W. y T.P. Kisala; Process Optimization by Simulation; Chem. Engng. Progress, Agosto, p. 60-66 (1987).
- Han, S.P.; A globally convergent method for nonlinear programming; J. Optimization Theory Applic., 22, p. 297 (1977).
- Jirapongphan, S.; Simultaneous Modular Convergence in Process Flowsheet Optimization; Ph.D. Thesis, Massachusetts Institute of Technology (1980).
- Kisala, T.P., R.A. Trevino-Lozano, J.F. Boston y H.I. Britt; Sequential Modular and Simultaneous Modular Strategies for Process Flowsheet

Optimization; Comput. Chem. Engng., 11, p. 567-579 (1987).
- Lang. Y.D. y L.T. Biegler; A Unified Algorithm for Flowsheet Optimization; Comput. and Chem. Engng., 11, p. 143-158 (1987).
- Montagna, J.M.; Estrategias para la simulación de procesos con el enfoque modular secuencial; Tesis doctoral, Universidad Nacional del Litoral (1987).
- Montagna, J.M.; Problem-Oriented Modules for Process Simulation. Resolution Strategies for Simulation and Optimization; The Canadian J. of Chem. Engng., 71, p. 634-641 (1993).
- Montagna, J.M. y O.A. Iribarren; Optimal Computation Sequence in the Simulation of Chemical Plants; Comput. Chem. Engng., 12, p. 71-79 (1988).
- Montagna, J.M., H.P. Leone, T.R. Melli, A.R. Vecchietti y R.L. Cerro; SIMBAD: A Process Simulator Linked to a DBMS. Part 1: The Executive System; Computers and Chem. Engng., 11, p. 63 (1987).
- Murtagh, B.A.; On the simultaneous solution and optimization of large-scale engineering systems; Computers and Chemical Engineering, 6, p. 1-5 (1982).
- Perkins, J.D.; Equation-Oriented Flowsheeting; trabajo presentado en FOCAPD-83, Snowmass, Colorado, EEUU (1983).
- Pierucci, S., M. Ranzi y G. Biardi; Solution of Recycle Problems in a Sequential Modular Approach; AIChE J., 28, p. 820 (1982).
- Powell, M.J.D.; A fast algorithm for nonlinearly constrained optimization, Lecture Notes in Math., # 630, p. 144, Springer, Berlin (1978).
- Shacham, M., S. Macchietto, L.F. Stutzman y P. Babcock; Equation oriented Approach to Process Flowsheeting, Comp. and Chem. Engng., 6, p. 79 (1982).
- Sood, M.K., G.V. Reklaitis; Solution of material balances for flowsheets modelled with elementary modules: the constrained case; AIChE J., 25, p.220 (1979).
- Sood, M.K., G.V. Reklaitis y J.M. Woods; Solution of material balances for flowsheets modelled with elementary modules: the unconstrained case; AIChE J., 25, p. 209 (1979).
- Trevino-Lozano, R.A.; Simultaneous modular concept in chemical process simulation and optimization; Ph.D Thesis, Department of Chemical Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Cambridge (1985).
- Westerberg, A.W.; Optimization in Computer Aided Design, Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design, Editado por R.S.H. Mah y W.D. Seider, Engineering Foundation, Nueva York, p.149-184 (1981).
- Westerberg, A.W., H.P. Hutchison, R.L. Motard y P. Winter; Process Flowsheeting, Cambridge University Press, Cambridge (1979).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XIII

MÉTODOS NUMÉRICOS APROXIMACIÓN PARA LA SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS

Por
Nicolás J. Scenna y Alejandro S. M. Santa Cruz

XIII.1 INTRODUCCIÓN

El comportamiento de muchos procesos fisicoquímicos en ingeniería química, particularmente aquellos que experimentan cambios dependientes del tiempo (transitorios), se modelan a través de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias. De aquí resulta la importancia que adquiere para ingenieros y científicos el conocimiento de métodos de resolución de este tipo de ecuaciones. Si bien muchas ecuaciones diferenciales ordinarias importantes se pueden resolver a través de técnicas analíticas bien conocidas, un gran número de ecuaciones diferenciales físicamente significativas no pueden resolverse de esta forma. En este capítulo se describirán someramente algunos de los métodos de resolución más importantes, como ya se hizo con los sistemas de ecuaciones algebraicas en los Capítulos III y IV.

XIII.2 ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE ORDEN N

Considérese la siguiente ecuación diferencial:

$$f\ (t,\ y,\ \frac{dy}{dt},\ \frac{d^2y}{dt^2},\ ...\ ,\frac{d^ny}{dt^n})\ =\ 0 \qquad (1)$$

Una ecuación diferencial expresada a través de la Ecuación (1) se llama de *orden n* debido a que el orden más elevado de derivación de la función *y* es *n*, y ordinaria debido a que aparecen sólo derivadas totales (esto es, no hay derivadas parciales presentes, o, alternativamente, la variable dependiente *y* sólo es función de una variable independiente *t*).

Una función *y(t)* que satisface a la Ecuación (1), lo cual implica que *y(t)* es *n* veces derivable, se llama *solución de la ecuación diferencial*.

Para obtener una única solución de la Ecuación (1) (en general existen muchas funciones que la satisfacen), es necesario suministrar algún tipo de información adicional, por ejemplo, valores de *y(t)* y/o de sus derivadas en valores específicos de *t*. Para determinar una solución única de la *ecuación diferencial*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ordinaria de orden n, normalmente es suficiente con especificar *n* condiciones (n integraciones de la ecuación diferencial). Si todas las condiciones se especifican en $t = t_0$, entonces al problema se lo llama de *condiciones iniciales*. Cuando está involucrado más de un valor de *t*, el problema se llama de *condiciones de contorno*.

Una EDO (ecuación diferencial ordinaria) de orden *n* puede escribirse como *un sistema de n ecuaciones diferenciales de 1er. orden*, definiendo *(n-1)* nuevas variables. Por ejemplo, consideremos la ecuación de Bessel (ecuación diferencial ordinaria de 2do. orden):

$$t^2 \frac{d^2y}{dt} + t \frac{dy}{dt} + (t^2 - p^2)\, y = 0 \qquad (2)$$

donde *p* es una constante. Definamos una nueva variable:

$$y_1 = \frac{dy}{dt} \qquad (3)$$

entonces se cumple que:

$$\frac{dy_1}{dt} = \frac{d^2y}{dt^2}$$

Por lo tanto, la EDO de 2do. orden puede reescribirse como un par de EDOs de 1er. orden, con y_1 e *y* como funciones incógnitas,

$$y_1 - \frac{dy}{dt} = 0 \qquad (4a)$$

$$t^2 \frac{dy_1}{dt} + t\, y_1 + (t^2 - p^2)\, y = 0 \qquad (4b)$$

Dado que la mayoría de las EDOs de órdenes superiores pueden escribirse en forma similar, sólo se describirá la solución numérica de EDOs de 1er. orden.

XIII.3 SOLUCIÓN DE ECUACIONES DIFERENCIALES ORDINARIAS DE 1er. ORDEN

Sea

$$F\left(t,\ y,\ \frac{dy}{dt}\right) = 0$$

una EDO de 1er. orden. Alternativamente puede escribirse en forma explícita como:

$$\frac{dy}{dt} = f\,(t,\; y) \tag{5}$$

Se quiere determinar una solución que satisfaga a la Ecuación (5) y a una condición inicial especificada. En general, en la mayoría de los problemas de ingeniería es imposible determinar *y(t)* en forma analítica. En su lugar, se divide el intervalo de variación de la variable independiente *t*, *[a,b]*, en subintervalos o *pasos* en los que se aproxima el valor de la solución verdadera *y(t)* en *(n+1)* valores igualmente espaciados de *t* : t_0, t_1 ,..., t_n, de manera que el tamaño del paso se exprese como:

$$h = \frac{b - a}{n}$$

y

$$t_i = t_0 + i\,h \;;\; i = 0,\; 1,\; 2,...,\; n$$

Luego, la solución se da en forma tabular para *(n+1)* valores discretos de *t*. Esta tabla contiene valores muestreados de una aproximación particular de la solución de la ecuación. Sea $y(t_i)$ la solución verdadera en los puntos base t_i y sea y_i la aproximación calculada, entonces:

$$y_i \cong y(t_i) \tag{6}$$

La derivada verdadera *dy/dt* en los puntos base será aproximada por $f\,(t_i\,, y_i)$ (Ecuación 5); en forma abreviada f_i. En la medida que se verifiquen exactamente los requisitos de cálculo numérico, esto es, sin errores de redondeo, la diferencia

$$|\varepsilon_i| = |y_i - y(t_i)| \tag{7}$$

se denomina *error de discretización o de truncamiento*. El error de truncamiento queda determinado únicamente por el particular procedimiento o método numérico utilizado, esto es, por la naturaleza de las aproximaciones efectuadas en el método. Este tipo de error es independiente de las características del hardware utilizado.

Una clase de error esencialmente diferente proviene del diseño de los equipos de computación. En la práctica, éstos tienen una memoria finita y por consiguiente almacenan un tamaño finito de número. En efecto, las computadoras científicas usualmente poseen una longitud fija de palabra, esto es, el número de dígitos retenidos por cualquier resultado calculado está fijo, reteniendo un cierto número de

cifras significativas. Por consiguiente, cualquier número irracional o cualquier número con más cifras significativas que las que pueden ser retenidas y que se producen en cada secuencia de cálculo, debe ser aproximado por valores numéricos *redondeados*.

El error involucrado se denomina *error de redondeo* y para cualquier método numérico queda determinado por las características del equipo de computación que efectúa los cálculos, el orden de las operaciones de la máquina para implementar el algoritmo, si se trabaja en simple o doble precisión, etc. Es por ello que en general se evita tener que realizar un gran número de operaciones durante el cálculo en los intervalos de integración. Los únicos errores que analizaremos en adelante son aquellos que provienen de la discretización de las ecuaciones diferenciales, esto es, aquellos inherentes al método numérico implementado. Como se verá más adelante, el tema del error es muy importante, en particular vinculado a métodos explícitos de integración de las EDOs. Los algoritmos numéricos comunes para resolver EDOs con condiciones iniciales $y(t_0)$ se basan en alguno de los siguientes enfoques:

I) Uso directo o indirecto de la expansión en series de Taylor de la función solución $y(t)$.

II) Uso de fórmulas de integración abiertas o cerradas.

A su vez, los diversos procedimientos pueden clasificarse de un modo general en dos grupos:

1) Métodos de paso simple

2) Métodos de paso múltiple

Los métodos de paso simple permiten el cálculo de y_{i+1} dadas solamente la ecuación diferencial y la información en el punto t_i, esto es, el valor y_i.

Los métodos de paso múltiple requieren además valores de y_i y/o f_i en otros valores de t, fuera del intervalo de integración considerado, $[t_i , t_{i+1}]$. Una desventaja de estos métodos es que requieren más información de la que normalmente se dispone para arrancar el procedimiento. Por lo general se da una condición inicial, por ejemplo, $y(t_0)$; los valores siguientes $y(t_1)$, $y(t_2)$ no se conocen. Por consiguiente, en un método de paso múltiple, debe utilizarse algún otro método para arrancar.

XIII.4 APROXIMACIÓN A LA SOLUCIÓN MEDIANTE EXPANSIÓN EN SERIES DE TAYLOR

Un método natural para aproximar numéricamente a la solución de una EDO de primer orden del tipo de la Ecuación (5) es expresar a la solución $y(t)$ alrededor de un punto de partida t_0 mediante una expansión en serie de Taylor,

$$y(t_0 + h) = y(t_0) + h\, f\,[t_0,\, y(t_0)] + \frac{h^2}{2!}\, f'[t_0,\, y(t_0)] + \frac{h^3}{3!}\, f''[t_0,\, y(t_0)] + \cdots \quad (8)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde

$$f^{/}[t_0,\ y(t_0)] = \frac{d}{dt}\,[f\ (t,\ y(t))]_{t=t_0}$$

$$f^{//}[t_0,\ y(t_0)] = \frac{d^2}{dt^2}\,[f\ (t,\ y(t))]_{t=t_0}$$

y así sucesivamente. Si se especifica la condición inicial $y(t_0)$, $y(t)$ puede calcularse directamente de la EDO (Ecuación (5)),

$$\frac{dy}{dt} = f\ (t,\ y)$$

Para evaluar las derivadas de orden superior se debe derivar *f (t,y)* utilizando la regla de la cadena, entonces:

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial y}\,\frac{dy}{dt} \qquad (9)$$

Ejemplo 1: Sea

$$\frac{dy}{dt} = f\ (y) = k\ y \qquad (10)$$

sujeta a la condición inicial $y(t_o) = y_o$. Si se deriva la Ecuación (10) aplicando la regla de la cadena se obtiene:

$$f^{/}(t,\ y) = \frac{\partial f}{\partial y}\,\frac{dy}{dt} = k^2\ y$$

$$f^{/}(t_0,\ y_0) = k^2\ y_0$$

$$f^{//}(t,\ y) = \frac{df^{/}}{dt} = \frac{\partial f^{/}}{\partial y}\,\frac{dy}{dt} = k^3\ y$$

$$f^{//}(t_0,\ y_0) = k^3\ y_0$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$f^{///}(t,\ y)\ =\ \frac{df^{//}}{dt}\ =\ \frac{\partial f^{//}}{\partial y}\ \frac{dy}{dt}\ =\ k^4\ y$$

$$f^{///}(t_0,\ y_0)\ =\ k^4\ y_0$$

$$f^{n}(t,\ y)\ =\ k^{n+1}\ y\quad ;\quad f^{n}(t_0,\ y_0)\ =\ k^{n+1}\ y_0$$

La expansión en serie de Taylor $y(t)$ alrededor de $t = t_0$ resulta:

$$y(t_0+h)\ =\ y(t_0)\ [1\ +\ k\ h\ +\ \frac{(k\ h)^2}{2!}\ +\ \frac{(k\ h)^3}{3!}\ +\ \frac{(k\ h)^4}{4!}\ +\ ...] \qquad (11)$$

Por otro lado, después de separar variables, la integración directa de la Ecuación (10) es:

$$\int_{y_{(t_0)}}^{y_{(t_0+h)}} \frac{dy}{y}\ =\ k\ \int_{t_0}^{t_0+h}\ dt$$

que genera la solución

$$\ln\ y\ \Big|_{y(t_0)}^{y(t_0+h)}\ =\ k\ t\Big|_{t_0}^{t_0+h}$$

ó

$$\ln\ [\frac{y(t_0+h)}{y(t_0)}]\ =\ k\ h$$

de donde se obtiene la solución analítica:

$$y(t_0+h)\ =\ y(t_0)\ e^{kh} \qquad (12)$$

Por otra parte, el factor

$$[1\ +\ k\ h\ +\ \frac{(k\ h)^2}{2!}\ +\ \frac{(k\ h)^3}{3!}\ +\ ...]$$

en el segundo miembro de la Ecuación (11) representa la expansión en serie de Taylor de la función $e^{k\,h}$ alrededor del origen, por consiguiente, las soluciones (11) y (12) coinciden con una exactitud determinada por el número de términos retenidos en la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

serie. En efecto, si se retienen los términos hasta el que incluye a $f^{(n-1)}$, entonces el error viene expresado por (Ecuación (7)):

$$\varepsilon = y(\xi_j) \frac{(k\ h)^{n-1}}{(n+1)!} \quad ; \quad \xi_j \in (t_0\ ,\ t_0+h)$$

El procedimiento para pasar de un valor de t a otro, esto es, de t_0 a t_0+h, se deduce de la expansión en serie de Taylor de $y(t)$ alrededor de $t = t_0$. Para pasar de un valor arbitrario t_i a $t_{i+1} = t_i+h$, los algoritmos se basan en la expansión en serie de Taylor de $y(t)$ alrededor de t_i.

$$y(t_{i+1}) = y(t_i+h) = y(t_i) + h\ f\ [t_i,\ y(t_i)] + \frac{h^2}{2!} f^{/}\ [t_i,\ y(t_i)] + \frac{h^3}{3!} f^{//}\ [t_i,\ y(t_i)] + \frac{h^4}{4.^{/}} f^{///}\ [t_i,\ y(t_i)] + \\ + \frac{h^n}{n!} f^{(n-1)}[t_i,\ y(t_i)] + \frac{h^{(n+1)}}{(n+1)!} f^{(n)}[\xi_i,\ y(\xi_i)] \quad ; \quad \xi_i \in (t_i,\ t_i + h) \tag{13}$$

Los algoritmos que resultan de despreciar el último término en el 2do. miembro de la Ecuación (13) y de reemplazar $y(t_{i+1})$ por y_{i+1} en el lado izquierdo e $y(t_i)$ por y_i en el lado derecho para evaluar las derivadas sucesivas de $y(t)$, se llaman de orden h^n. El *error local de truncamiento* e_t, introducido por una aplicación del desarrollo en serie, está acotado como sigue:

$$|e_t| \leq \frac{h^{n+1}}{(n+1)!}\ \mathrm{E} \tag{14}$$

donde:

$$\mathrm{E} \geq |\ f^n\ [\xi\ ,\ y(\xi)]|_{máx} \quad ; \quad \xi \in (t_i\ ,\ t_{i+1})$$

Lamentablemente, en general, la derivación de $f(t,y)$, se vuelve muy complicada. Por lo tanto, con excepción del caso más simple,

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\ f(t_i) + o(h^2) \tag{15}$$

la expansión directa en serie de Taylor (Ecuación 13) de la función $y(t)$ no se usa para resolver EDOs. Dado que, usualmente, $y(t_o)$ es el único valor de $y(t)$ que se conoce exactamente (se supone que la condición inicial está libre de errores), en la Ecuación (15) debe reemplazarse $y(t_i)$ por y_i. Por consiguiente, el algoritmo adopta la forma:

$$y_1 = y\ (t_0) + h\ f\ [t_0,\ y(t_0)] \tag{16a}$$

que es conocido como Método de Euler, con expresión genérica:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1} = y_i + h\ f\ (t_i,\ y_i) = y_i + h\ f_i \qquad (16b)$$

donde *i* indica el orden temporal (u orden) en que se obtienen los sucesivos valores tabulares de *y(t)*.

XIII.5 MÉTODOS EXPLÍCITOS DE RESOLUCIÓN DE EDOs

Los algoritmos explícitos de resolución de EDOs implican la evaluación explícita de las derivadas y el avance paso a paso en el tiempo sin necesidad de recurrir a procedimientos iterativos. Existen dos métodos muy difundidos y fáciles de usar que utilizan arranque automático. Estos son:

- El Método de Euler
- El Método de Runge-Kutta de 4to. orden

Existen, por otra parte, cientos de algoritmos de esta naturaleza. Muchos de ellos son bastante complejos, difíciles de programar y de supervisar. Aquí se profundizará en los mencionados arriba, ya que son los más utilizados en una gran cantidad de problemas prácticos.

XIII.5.1 Método de Euler

En razón que el Método de Euler de simple paso (Ecuaciones (16)) es el más simple y el más ameno para el análisis de la propagación del error, será discutido en detalle, aún cuando limitaciones en su exactitud impiden su uso en algunos problemas prácticos (sistemas *stiff*).

Es posible efectuar una interpretación geométrica simple de la Ecuación (16a). La solución en el intervalo $[t_0, t_1]$ se supone que sigue la línea tangente a *y(t)* en $t = t_0$ (ver Figura (XIII.1)).

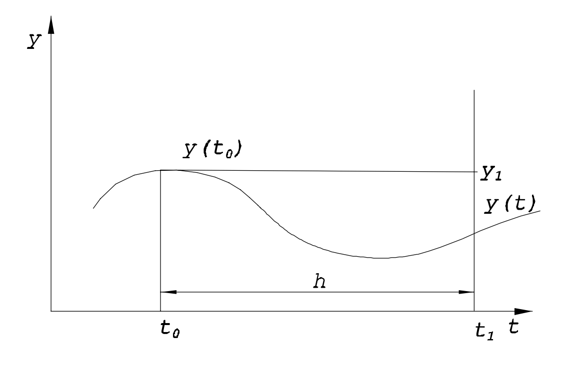


Figura XIII.1: Método de Euler.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Si el método de Euler se aplica repetidamente en forma secuencial a través de los diferentes intervalos, la solución numérica dibuja un polígono cuyos lados poseen pendientes f_i *con* $i = 1, 2, ... , n-1$.

Ejemplo 2: Sea la EDO expresada por la Ecuación (10) con $k = 3$,

$$\frac{dy}{dt} = 3\ y$$

sujeta a la condición inicial $y(t_0 = 0) = y_0 = 1$. La solución analítica para esa condición inicial es, según vimos:

$$y(t) = e^{3\,t}$$

En la Tabla (XIII.1) se muestra la solución de Euler para un tamaño de paso $h = 0.1$ y un límite superior de integración $t_{10} = 1$. La columna (2) de la Tabla (XIII.1) contiene los valores calculados y_i a partir de las Ecuaciones (16), redondeadas a 4 cifras. La columna (3) contiene los valores calculados de la derivada, $f(t_i, y_i) = f_i$ con cuatro cifras retenidas. La columna (4) muestra las soluciones verdaderas redondeadas a 4 cifras. La columna (5) presenta la evolución del error absoluto total de truncamiento redondeado a 4 cifras para cada valor t_i (ver Ecuación (7)). En la columna (6) se presenta el error relativo local de truncamiento. Finalmente, en la columna (7) se muestra la evolución del máximo error local de truncamiento calculado a partir de la expansión en serie de Taylor para $n = 1$ (Ecuaciones (13) y (14)),

$$|e_t| = \frac{h^2}{2!} \left| f^{\prime}\ [\xi,\ y(\xi)] \right| \quad ; \quad \xi \in (t_i\ ,\ t_{i+1}) \tag{17}$$

En el caso de la EDO de referencia resulta que:

$$f^{\prime}(t,y) = \frac{d^2y}{dt^2} = 9\ e^{3\,t}$$

Dado que e^{3t} es una función monótona creciente de t, su valor máximo se encuentra en el extremo superior del intervalo $[t_i , t_{i+1}]$, por consiguiente:

$$|e_t|_{máx.} = \frac{h^2}{2!}\ (9\ e^{3\ t_{i+1}}) \tag{18}$$

Desafortunadamente, esta cota del error de truncamiento sólo es válida para el

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

algoritmo determinado por la Ecuación (16a) deducida a partir de la expansión en serie de Taylor (Ecuación (13)),

$$y_{i+1} = y(t_i) + h\ f\ [t_i,\ y(t_i)]$$

Para efectuar la integración general entre t_i y t_{i+1}, esto es, los resultados de la columna (3) de la Tabla (XIII.1), el algoritmo se expresa a través de la Ecuación (16b),

$$y_{i+1} = y_i + h\ f\ (t_i,\ y_i)$$

El valor de y_i utilizando en cada intervalo, excepto el primero donde $y_0 = y(t_0)$ es inexacto, siendo el resultado de cálculos previos los cuales involucran los errores de truncamiento acumulados en las etapas anteriores.

Tabla XIII.1: Solución de la ecuación *dy /dt = 3 y* mediante el Método de Euler.

Método de Euler						
Ecuación Diferencial		Condición Inicial		Solución Analítica		Paso
y ' = 3 y		y (t = 0) = 1		y = exp (3 t)		h = 0.1
t_i	y_i	$f(t_i, y_i)$	$y(t_i)$	Error Absoluto	Error Relativo (%)	Máximo Error Local de Truncamiento
0.0	1.0000	3.0000	1.0000			
0.1	1.3000	3.9000	1.3499	0.0499	3.69	0.06
0.2	1.6900	5.0700	1.8221	0.1321	7.25	0.08
0.3	2.1970	6.5910	2.4596	0.2626	10.68	0.11
0.4	2.8561	8.5683	3.3201	0.4640	13.98	0.15
0.5	3.7129	11.1388	4.4817	0.7688	17.15	0.20
0.6	4.8268	14.4804	6.0496	1.2228	20.21	0.27
0.7	6.2749	18.8246	8.1662	1.8913	23.16	0.37
0.8	8.1573	24.4719	11.0232	2.8659	26.00	0.50
0.9	10.6045	31.8135	14.8797	4.2752	28.73	0.67
1.0	13.7858	41.3575	20.0855	6.2997	31.36	0.90

En la Tabla (XIII.2) se comparan los resultados obtenidos al aplicar el Método de Euler a la ecuación diferencial del Ejemplo (2) para dos pasos diferentes de integración (*h=0.1* y *h=0.01*). Se observa que al reducir el paso de integración en un orden de magnitud, el error relativo que se comete en la evaluación de la solución

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

para el tiempo $t_f=1$ se reduce casi 8 veces.

Tabla XIII.2: Comparación de las soluciones para dos pasos diferentes de la ecuación diferencial *dy /dt = 3 y* obtenidas mediante el Método de Euler.

Paso	**Iteraciones**	**t_f**	**y_f**	**y (t_f)**	**Error Absoluto**	**Error Relativo (%)**
h = 0.1	10	1.0	13.786	20.086	6.300	31.364
h = 0.01	100	1.0	19.219	20.086	0.867	4.316

Propagación del error en el Método de Euler

Se examinará a continuación la propagación de los errores locales de discretización en el método de Euler cuando se aplica a problemas de valores iniciales.

Supongamos que *f(t, y)* y sus derivadas parciales de primer orden sean funciones continuas y acotadas en la región $a \le t \le b$, $-\infty \le y \le \infty$. Supongamos además que existe una solución *y(x)*. Entonces deben existir constantes *M* y *K* tales que:

$$|y''(t)| = \left|\frac{\partial f(t, y)}{\partial t} + f(t, y)\,\frac{\partial f(t, y)}{\partial y}\right| \le M \tag{19}$$

y

$$|f(t, y^*) - f(t, y)| = \left|\frac{\partial f(t, \alpha)}{\partial y}\right| |y^* - y| \le K\,|y^* - y| \tag{20}$$

donde $y^* < \alpha < y$ para *(t,y)*, (t,y^*) en la región *t*. La Ecuación (20) se deduce directamente del teorema diferencial del valor medio. Si ε_i representa el error entre la solución exacta y la aproximada (ver Ecuación (7)), entonces el error adicional que se genera al incrementar el paso de integración, resulta:

$$\Delta\varepsilon_i = \Delta y_i - \Delta y(t_i) \tag{21}$$

o, en forma equivalente

$$\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i = y_{i+1} - y_i = [y(t_{i+1}) - y(t_i)] \tag{22}$$

sujeto a la condición $\varepsilon_0 = 0$. Del algoritmo de Euler se tiene:

$$y_{i+1} = y_i + h\, f(t_i, y_i)$$

mientras que de la expansión en serie de Taylor surge:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\, f\, [t_i,\, y(t_i)] + \frac{h^2}{2!}\, f^{/}\, [\xi,\, y(\xi)] \qquad (23)$$

con $\xi \in (t_i\, ,\, t_{i+1})$. Por consiguiente, la Ecuación (21) es equivalente a

$$\Delta\varepsilon_i = h\, [f\, (t_i,\, y_i) - f\, [t_i,\, y(t_i)]] - \frac{h^2}{2}\, f^{/}[\xi,\, y(\xi)] \qquad (24)$$

Entonces, de las Ecuaciones (19) y (20) resulta

$$|\Delta\varepsilon_i| = |\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| \leq h\, K\, |y_i - y(t_i)| + \frac{M}{2}\, h^2$$

ó

$$|\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| \leq h\, K\, |\varepsilon_i| + \frac{M}{2}\, h^2 \quad ; \quad i \geq 0 \qquad (25)$$

Además, dado que

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq |\varepsilon_{i+1} - \varepsilon_i| + |\varepsilon_i| \qquad (26)$$

La Inecuación (26) puede reescribirse como

$$|\varepsilon_{i+1}| \leq (1 + h\, K)\, |\varepsilon_i| + \frac{M}{2}\, h^2 \quad ; \quad i \geq 0 \qquad (27)$$

Para determinar $/\varepsilon_i/$, se debe aplicar repetidamente la Inecuación (27) con el valor de arranque $\varepsilon_0 = 0$. Sin embargo, puede probarse por inducción que la Desigualdad (27) tiene una solución general de la forma:

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{M\, h}{2\, K}\, [(1 + h\, K)^i - 1] \qquad (28)$$

La solución de la Inecuación (27), esto es, la Inecuación (28), se puede simplificar si se tiene cuenta que:

$$(1 + h\, K) < e^{hK} \qquad (29)$$

que se deduce de la expansión en serie de Taylor de $e^{h\,k}$.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Si se sustituye la Inecuación (29) en la (28) se obtiene:

$$|\varepsilon_i| \leq \frac{M\ h}{2\ K} (e^{ihK} - 1) \leq \frac{M\ h}{2\ K} e^{ihK} \quad (30)$$

Para $n\ h = t_n - t_0 = L$, esto es, el intervalo total constante de integración, la Inecuación (30) puede escribirse como:

$$|\varepsilon_n| \leq \frac{M\ h}{2\ K} e^{LK} \quad (31)$$

Entonces, cuando h tiende a 0, el error tiende a cero, así:

$$\lim_{h \to 0} |\varepsilon_n| \leq \lim_{h \to 0} \frac{M\ h}{2\ K} e^{LK} = 0$$

Esta última expresión es cierta pese al hecho que $n \to \infty$ cuando $h \to 0$. Un procedimiento numérico para el que

$$\lim_{h \to 0} |\varepsilon_i| = 0$$

cuando $0 \leq i \leq n$, se dice convergente. Por consiguiente, el Método de Euler converge con un error total de truncamiento:

$$|\varepsilon_i| = |y_i - y\ (t_i)| = o(h)$$

Obsérvese que, sin embargo, el error local de truncamiento (Ecuación (17)) para el Método de Euler es del orden de h^2.

Lamentablemente, en problemas prácticos en los cuales se presentan cientos e incluso miles de ecuaciones diferenciales en forma simultánea y con expresiones en general sumamente complejas, es virtualmente imposible aplicar las fórmulas anteriores para estimar a priori una cota al error esperado en función del paso h seleccionado. Por lo general, ante problemas de tal naturaleza, se recurre a seleccionar pasos sucesivamente decrecientes por métodos de prueba y error, experimentando en las sucesivas soluciones. En particular, se observan las propiedades de las curvas obtenidas como solución (continuidades, etc.) y su verificación respecto del problema modelado (esto es la interpretación física de la solución, etc.).

XIII.5.2 Métodos de Runge-Kutta

En general, la solución de una EDO por expansión directa en series de Taylor de la función objeto no es práctica si se necesita retener derivadas de orden

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

superior al primero, ya que, con excepción de los casos más simples, las derivadas de orden superior que se necesita conservar son bastante complicadas. Por otra parte, es necesario destacar que cada problema que se plantea genera una serie específica para su solución. Por lo tanto, cuando se desee trabajar con errores de orden superior, no pueden desarrollarse algoritmos de cálculo análogos al método de Euler, directamente de la expansión en serie de Taylor. Sin embargo, con ingenio, es posible desarrollar un método de paso simple que involucre evaluaciones de derivadas de primer orden y que produzca resultados equivalentes en seguridad a las fórmulas de Taylor de orden superior. Estos algoritmos pertenecen a la familia identificada con el nombre de métodos de Runge-Kutta. Aproximaciones del segundo, tercer y cuarto orden (exactitud equivalente a expansiones en series de Taylor de $y(t)$ que retienen términos en h^2, h^3, y h^4, respectivamente) requieren de la estimación de $f(t,y)$ en dos, tres y cuatro valores de t, respectivamente, en el intervalo $[t_i, t_{i+1}]$. Los métodos de orden $m>4$ requieren de las evaluaciones en más de m puntos próximos.

Todos los métodos de Runge-Kutta tienen algoritmos de la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h\, \Phi(t_i, y_i, h) \tag{32}$$

donde Φ representa una aproximación adecuada a $f(t,y)$ sobre el intervalo $[t_i, t_{i+1}]$.

La función Φ recibe el nombre de *función incremento*. Debido a que hay una considerable cantidad de álgebra involucrada en el desarrollo de las fórmulas de Runge-Kutta de orden superior, sólo se desarrollará en detalle el más simple de estos procedimientos (el algoritmo de segundo orden).

Consideremos a Φ como el promedio pesado de dos evaluaciones, k_1 y k_2 de la derivada sobre el intervalo $[t_i, t_{i+1}]$:

$$\Phi = a\, k_1 + b\, k_2 \tag{33}$$

que conduce al algoritmo de Runge-Kutta:

$$y_{i+1} = y_i + h\, (a\, k_1 + b\, k_2) \tag{34}$$

Sea entonces:

$$k_1 = f\, (t_i, y_i) \tag{35}$$

$$k_2 = f\, [t_i + p\, h,\, y_i + q\, h\, k_1] \tag{36}$$

donde p y q son constantes que deben determinarse. Las cantidades $h\, k_1$ y $h\, k_2$ tienen

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

una interpretación geométrica simple que quedará clara una vez que se determinen p y q. Para ello, se recurre a expandir k_2 en una serie de Taylor como una función de dos variables, despreciándose aquellos términos en los que el exponente de h es > 1:

$$\begin{aligned} k_2 &= f\,[t_i + p\,h,\ y_i + q\,h\,f\,(t_i,\ y_i)] \\ &= f\,(t_i,\ y_i) + p\,h\,f_t\,(t_i,\ y_i) + q\,h\,f\,(t_i,\ y_i)\,f_y\,(t_i,\ y_i) + o(h^2) \end{aligned} \tag{37}$$

Reemplazando las Ecuaciones (35) y (37) en la Ecuación (34), se obtiene:

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h\,[\,a\,f\,(t_i,\ y_i) + b\,f\,(t_i,\ y_i)] + \\ &+ h^2\,[b\,p\,f_t\,(t_i,\ y_i) + b\,q\,f\,(t_i,\ y_i)\,f_y\,(t_i,\ y_i)] + o(h^3) \end{aligned} \tag{38}$$

donde f_t y f_y representan las derivadas parciales de la función f con respecto a t e y respectivamente.

Ahora, a partir de la expansión de la función objeto $y(t)$ alrededor de $t = t_i$ en serie de Taylor, buscamos otra expresión que nos permita, por igualación de coeficientes, encontrar las relaciones que necesitamos. Sea la expansión:

$$\begin{aligned} y(t_i+h) &= y(t_{i+1}) = y(t_i) + h\,f\,[t_i,\ y(t_i)] + \frac{h^2}{2!}\,f'\,[t_i,\ y(t_i)] + \\ &+ \frac{h^3}{3!}\,f''[\xi,\ y(\xi)] \end{aligned} \tag{39}$$

con $\xi \in (t_i\,,\ t_{i+1})$. Aplicando la regla de la cadena (Ecuación (9)) para el cálculo de la derivada, resulta que:

$$f'\,[t_i,\ y(t_i)] = f_t\,[t_i,\ y(t_i)] + f\,[t_i,\ y(t_i)]\,f_y\,[t_i,\ y(t_i)]$$

Reemplazando ahora esta última expresión en la Ecuación (39), se tiene:

$$\begin{aligned} y(t_i+h) &= y(t_{i+1}) \\ &= y(t_i) + h\,f\,[t_i,\ y\,(t_i)] + \frac{h^2}{2!}\,[f_t\,[t_i,\ y(t_i)] + f\,[t_i,\ y(t_i)]\,f_y\,[t_i,\ y\,(t_i)]] + \\ &+ \frac{h^3}{3!}\,f''[\xi,\ y(\xi)] \end{aligned} \tag{40}$$

con $\xi\,\varepsilon\,(t_i\,,\ t_{i+1})$. Comparando las Ecuaciones (38) y (40) , y si se igualan los términos con potencias iguales de h, obtenemos las siguientes relaciones:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Potencia de h	Expansión de y(t)	Algoritmo de Runge-Kutta
0	$y(t_i)$	y_i
1	$f\,[t_i,y(t_i)]$	$(a + b)\, f\,[t_i,y(t_i)]$
2	$(½)\,\{f_t[t_i, y(t_i)] + f_y\,[t_i, y(t_i)]\, f[t_i,y(t_i)]\}$	$b\,\{p\, f_t\,[t_i, y(t_i)] + q\, f_y\,[t_i, y(t_i)]\, f\,[t_i, y(t_i)]\}$

Puesto que asumimos $y_i = y(t_i)$ y dado que se busca la igualdad de los coeficientes de h^2 para toda función $f(t,y)$ adecuadamente diferenciable, podemos plantear:

$$a + b = 1$$

$$b\,p = \frac{1}{2}$$

$$b\,q = \frac{1}{2}$$

de donde

$$a = 1 - b \qquad (41a)$$

$$p = \frac{1}{2\,b} \qquad (41b)$$

$$q = \frac{1}{2\,b} \qquad (41c)$$

Dado que las tres ecuaciones (41) contienen 4 incógnitas (a, b, p y q), el sistema es indeterminado, esto es, una variable, por ejemplo b, puede elegirse arbitrariamente. Las elecciones más comunes son $b = 0.5$ o bien $b = 1$.

Caso : $\boldsymbol{b = 0.5}$

Para $b = 0.5$ se obtiene $a = 0.5$, $p = 1$ y $q = 1$. Entonces, el algoritmo (32) adopta la forma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left\{ f\,(t_i,\, y_i) + f\,[t_i + h,\, y_i + h\, f\,(t_i,\, y_i)] \right\} \qquad (42)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

que también puede escribirse como:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}\left[f\,(t_i,\, y_i) + f\,(t_{i+1},\, \bar{y}_{i+1})\right] \tag{43}$$

donde

$$\bar{y}_{i+1} = y_i + h\, f\,(t_i,\, y_i) \tag{44}$$

El algoritmo de simple paso determinado por las Ecuaciones (43) y (44) recibe el nombre de *Método Mejorado de Euler* o *Método de Heun* cuya interpretación geométrica se muestra en la siguiente figura:

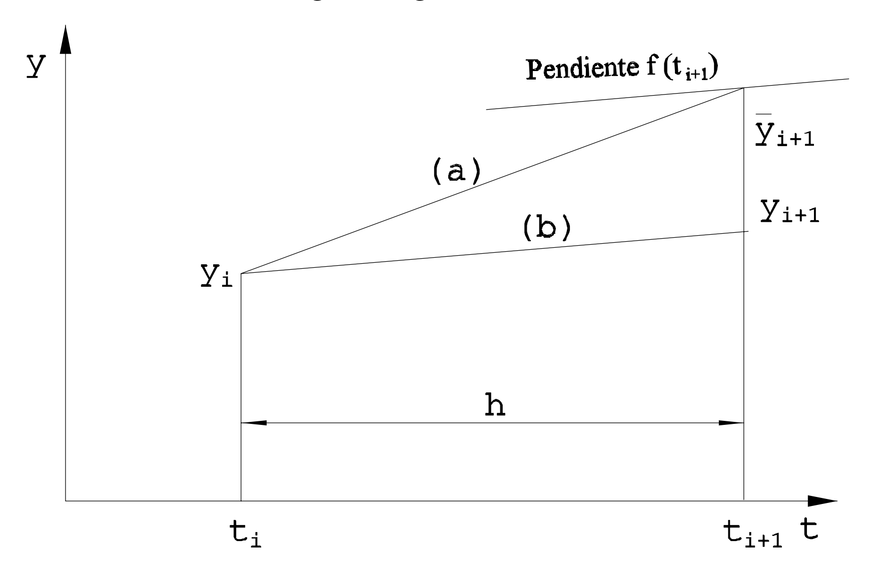


Figura XIII.2: Procedimiento de Runge-Kutta de 2do. orden (Método de Heun).

El *Método de Runge-Kutta de 2do. Orden* básicamente es el *Método de Euler* empleado secuencialmente dos veces. En efecto, en primer lugar se utiliza la Ecuación (44) pasa predecir $\bar{y}_{i+1}$, esto es, una estimación preliminar de y_{i+1}. El valor $\bar{y}_{i+1}$ es la ordenada en $t = t_{i+1}$ de la recta (a) que pasa a través de $(t_i,\, y_i)$ con pendiente $k_1 = f\,(t_i,\, y_i)$. En segundo lugar, se obtiene un valor mejorado de y_{i+1} a partir de la Ecuación (43). La pendiente de la recta (b) utilizada para este propósito es el promedio pesado de las aproximaciones de f en los dos extremos del intervalo. Obsérvese que la derivada verdadera en t_{i+1} es $f\,(t_{i+1},\, y_{i+1})$, que es aproximada por $f\,(t_{i+i},\, \bar{y}_{i+1})$, dado que $y(t_{i+1})$ es desconocida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El algoritmo de Euler (Ecuación (44)) puede visualizarse como una *ecuación predictora* de $\overline{y}_{i+1}^{(1)}$ (la primera aproximación de y_{i+1}), mientras que la Ecuación (43) puede considerarse como una *ecuación correctora* para mejorar la estimación de y_{i+1}. La Ecuación (43) puede utilizarse de manera iterativa para generar una secuencia de valores y_{i+1} corregidos, $\overline{y}_{i+1}^{(2)}$, $\overline{y}_{i+1}^{(3)}$, ... , $\overline{y}_{i+1}^{(m)}$. En este caso, las Ecuaciones (43) y (44) conducen al más simple de los denominados métodos corrector-predictor que se describen más adelante.

Caso : b = 1

Para $b = 1$ se obtiene $a = 0$, $p = 0.5$ y $q = 0.5$. Luego, la Ecuación (32) adopta la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h\, f\,(t_i + \frac{h}{2}, \overline{y}_{i+½}) \qquad (45)$$

donde

$$\overline{y}_{i+½} = y_i + \frac{h}{2}\, f\,(t_i, y_i) \qquad (46)$$

El algoritmo de simple paso determinado por las Ecuaciones (45) y (46) se denomina *Método Mejorado de la Poligonal* o *Método Mejorado de Euler*, como se ilustra en la Figura (XIII.3).

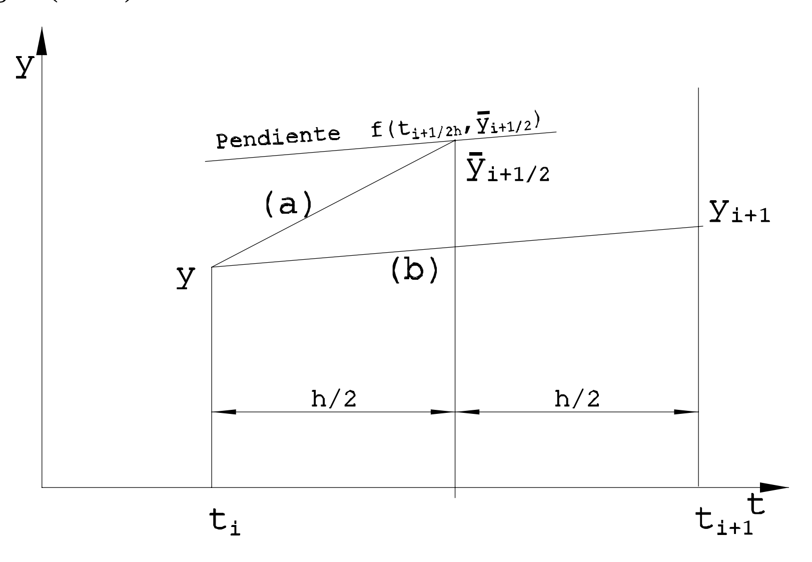


Figura XIII.3: Método Mejorado de la Poligonal.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Nuevamente, el Método de Euler se aplica secuencialmente dos veces. En primer lugar, a partir de la Ecuación (46) se obtiene una aproximación de $y_{i+½}$ en el punto medio $t_i + h/2$. En segundo lugar, la Ecuación (45) evalúa $f(t,y)$ en $t = t_i + h/2$, $y = \bar{y}_{i+½}$ y utiliza a este valor como derivada promedio sobre el intervalo total.

Los métodos de Runge-Kutta de orden tres y superiores se desarrollan en forma análoga. Sea la función incremento Φ para el método de 3er. orden:

$$\Phi = a\ k_1 + b\ k_2 + c\ k_3$$

donde k_1, k_2 y k_3 aproximan a la derivada en varios puntos del intervalo de integración $[t_i, t_{i+1}]$. En este caso tenemos:

$$k_1 = f\ (t_i,\ y_i)$$

$$k_2 = f\ (t_i + p\ h,\ y_i + p\ h\ k_1)$$

$$k_3 = f\ [t_i + r\ h,\ y_i + s\ h\ k_2 + (r - s)\ h\ k_1)]$$

donde todas las constantes deben ser determinadas de tal forma de plantear la aproximación:

$$y_{i+1} = y_i + h\ (a\ k_1 + b\ k_2 + c\ k_3) \qquad (47)$$

Las constantes a, b, c, p, r y s, se determinan igual que antes:

1[ero.]) Se expanden k_2 y k_3 en series de Taylor alrededor de $(t_i\ ,\ y_i)$ como funciones de dos variables.

2[do.]) La función objeto $y(t)$ se expande en serie de Taylor alrededor de $t = t_i$.

3[ero.]) Se igualan los coeficientes de los términos que incluyen a potencias de h de orden 0, 1, 2 y 3 para producir una fórmula con error de truncamiento de $o(h^4)$.

Nuevamente, se genera un sistema de ecuaciones con más incógnitas que ecuaciones,

$$a = b + c = 1$$

$$b\ p + c\ r = \frac{1}{2}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$b\ p^2 + c\ r^2 = \frac{1}{3}$$

$$c\ p\ s = \frac{1}{6}$$

Como el sistema es indeterminado, dos de las constantes *a, b, c, p, r* y *s* se eligen arbitrariamente. Para un conjunto de constantes seleccionadas por Kutta, el método de 3[er.] orden es:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 4\ k_2 + k_3)$$

$$k_1 = f\ (t_i,\ y_i)$$

$$k_2 = f\ (t_i + \frac{1}{2}\ h,\ y_i + \frac{1}{2}\ h\ k_1) \tag{48}$$

$$k_3 = f\ (t_i + h,\ y_i + 2\ h\ k_2 - h\ k_1)$$

Obsérvese que si $f = f(t)$, entonces la ecuación (48) se reduce a la regla de integración de Simpson. Todas las fórmulas de 4to. orden son de la forma:

$$y_{i+1} = y_i + h\ (a\ k_1 + b\ k_2 + c\ k_3 + d\ k_4) \tag{49}$$

donde k_1, k_2, k_3 y k_4 son valores aproximados de la derivada, calculados en el intervalo $t_i \le t \le t_{i+1}$. Se utilizan diversos algoritmos de 4to. orden. El siguiente se atribuye a Kutta:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2\ k_2 + 2\ k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f\ (t_i,\ y_i)$$

$$k_2 = f\ (t_i + \frac{h}{2},\ y_i + \frac{h}{2}\ k_1) \tag{50}$$

$$k_3 = f\ (t_i + \frac{1}{2}\ h,\ y_i + \frac{1}{2}\ h\ k_2)$$

$$k_4 = f\ (t_i + h,\ y_i + h\ k_3)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo 3: Sea la ecuación diferencial ordinaria

$$y' = -2\,y + t$$

sujeta a la condición inicial $y(t=0) = 1$. La solución analítica de esta ecuación es:

$$y = \frac{1}{4}\,[5\,\exp(-2t) - 1] + \frac{t}{2}$$

En la Tabla (XIII.3) se presentan los resultados numéricos de la ecuación diferencial luego de aplicar el algoritmo de Runge-Kutta de 4to. orden (Ecuación (50)) para un tamaño de paso $h = 0.1$ y un límite superior de integración $t_{10} = 1$.

Tabla XIII.3: Solución de la ecuación $dy/dt = -2\,y + t$ mediante el Método de Runge-Kutta.

Método de Runge-Kutta de 4to. Orden (Ecuación (50))							
Ecuación		Condición Inicial		Solución Analítica		Paso	
y ‘ = -2 y + t		y(t = 0) = 1		1/4 [5 exp (-2 t) -1]+t / 2		h = 0.1	
Iteración	t_i	hk_1	hk_2	hk_3	hk_4	y_i	$y(t_i)$
0	0					1	1
1	0.1	-0.2000	-0.1750	-0.1775	-0.1545	0.823417	0.823413
2	0.2	-0.1547	-0.1342	-0.1363	-0.1174	0.687905	0.687900
3	0.3	-0.1176	-0.1008	-0.1025	-0.0871	0.586021	0.586015
4	0.4	-0.0872	-0.0735	-0.0749	-0.0622	0.511668	0.511661
5	0.5	-0.0623	-0.0511	-0.0522	-0.0419	0.459857	0.459849
6	0.6	-0.0420	-0.0328	-0.0337	-0.0252	0.426500	0.426493
7	0.7	-0.0253	-0.0178	-0.0185	-0.0116	0.408253	0.408246
8	0.8	-0.0117	-0.0055	-0.0061	-0.0004	0.402377	0.402371
9	0.9	-0.0005	0.0046	0.0041	0.0087	0.406629	0.406624
10	1	0.0087	0.0128	0.0124	0.0162	0.419174	0.419169

Conocidas variantes del método de 4$^{to.}$ orden atribuidas a Kutta son:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6} [k_1 + 2 (1 - 1/\sqrt{2}) k_2 + 2 (1 + 1/\sqrt{2}) k_3 + k_4]$$

$$k_1 = f (t_i, y_i)$$

$$k_2 = f (t_i + 1/2 h, y_i + 1/2 h k_1) \qquad (51)$$

$$k_3 = f (t_i + 1/2 h, y_i + (- 1/2 + 1/\sqrt{2}) h k_1 + (1 - 1/\sqrt{2}) h k_2)$$

$$k_4 = f (t_i + h, y_i - 1/\sqrt{2} h k_2 + (1 + 1/\sqrt{2}) h k_3)$$

Si $f(t,y)$ es sólo función de t, la fórmula anterior no expresa otra cosa que la regla de integración de Simpson. Otra combinación muy conocida de valores para el método de cuarto orden es:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{8} (k_1 + 3k_2 + 3k_3 + k_4)$$

$$k_1 = f (t_i , y_i)$$

$$k_2 = f (t_i + \frac{1}{3} h , y_i + \frac{1}{3} h k_1) \qquad (52)$$

$$k_3 = f (t_i + \frac{2}{3} h , y_i - \frac{1}{3} h k_1 + h k_2)$$

$$k_4 = f (t_i + h , y_i + h k_1 - h k_2 + h k_3)$$

Dentro de este contexto, fórmulas del orden superior pueden obtenerse aplicando la metodología desarrollada.

Errores de truncamiento en el método de Runge-Kutta

Debido a la forma en que se obtienen las expresiones, el error de truncamiento local en un método de orden p tiene la forma:

$$e_t = K h^{p+1} + o(h^{p+2}) \qquad (53)$$

donde la constante K depende la función $f(t,y)$ y de sus derivadas parciales de orden superior de una manera usualmente complicada. Para valores pequeños de h, el primer término domina el valor del error y es posible determinar, aunque no de una manera simple, cotas al valor de K. En general, tales cotas dependen de las cotas para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

f (t,y) y sus derivadas parciales, y del particular método de Runge-Kutta utilizado.

En orden de elegir un tamaño razonable de paso, se requiere estimar el error que se comete en cada paso de integración. Por un lado, el tamaño de paso debe ser suficientemente pequeño como para alcanzar la exactitud requerida, y por otro lado, suficientemente grande para mantener bajo control a los errores de redondeo (función del número de operaciones aritméticas efectuadas) y evitar un número excesivamente grande de evaluaciones de derivadas. Esta última consideración es muy importante, especialmente cuando la EDO es muy complicada y cada derivada requiere de un sustancial tiempo de cálculo. En efecto, en un método de orden *p*, deben evaluarse para cada paso, *p* derivadas de la función.

Una simplificación es considerar que en la Ecuación (53) *K* es constante; siendo el primer término el dominante. De esta forma, se puede demostrar, por

$$e_t \cong K\, h^5 \cong \frac{16}{15}\,(y_{n+1,2} - y_{n+1,1}) \qquad (54)$$

ejemplo para $p = 4$, que una aproximación al error local de truncamiento se expresa: donde *n* es el paso de integración y los índices *1* y *2* indican evaluaciones para diferentes incrementos h_1 y h_2 respectivamente. En general la evaluación paso a paso es muy engorrosa y sólo se realiza cada cierta cantidad de pasos. Por otro lado, se han propuesto otros procedimientos para estimar el error, pero no son de utilidad en todos los casos.

Otro criterio a analizar es la *estabilidad*. Una solución se dice inestable si los errores introducidos en una etapa o paso (por ejemplo, por redondeo en las operaciones o por truncamiento o errores en la condición inicial especificada) se propagan a través de los próximos pasos sin cota alguna (divergen).

Para ciertos casos (dependiendo de la función y el estado inicial adoptado) pueden encontrarse comportamientos inestables (divergencia). A estos casos, que en general no dependen del algoritmo utilizado, sino de la función y de la condición inicial, se los llama de inestabilidad intrínseca o inherente. Por otro lado, para ciertas funciones y condiciones iniciales propuestas, dependiendo del método de integración usado, podemos o no encontrar inestabilidad. A este tipo se lo denomina inestabilidad parcial. Este fenómeno deriva de la longitud del paso adoptado.

Se puede demostrar que la cantidad $[(1+h(\partial f/\partial y)]$ llamada factor de propagación del paso, es fundamental en la propagación del error. Por lo tanto, si es positivo en un cierto intervalo, el error se incrementará sucesivamente. Esto se puede manejar mediante elecciones de *h* muy pequeños para mantener el factor cercano a uno. De otra forma, si consideramos que $h\,(\partial f/\partial y)$ debe mantenerse esencialmente constante, tenemos otro criterio para elegir el valor de *h* durante la integración.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

XIII.6 MÉTODOS DE MÚLTIPLE PASO

Hasta aquí hemos analizado sólo métodos paso a paso que se basan en la estimación (extrapolación) de los valores de la función en el punto *(i+1)*, a partir de las derivadas y/o valores de la función en el punto *i*. Sin embargo, existen además otras familias de métodos que involucran en el cálculo el valor de la derivada en puntos anteriores *i-1*, *i-2*, etc. A estos métodos se los denomina también explícitos o métodos predictores.

Existen además otras familias de métodos que involucran en el cálculo el valor de la derivada en el punto *(i+1)*, esto es $f_{i+1}=f(t_{i+1}, y_{i+1})$, que depende del valor de la función en el punto que se desea calcular, y_{i+1}, el cual no se conoce. Ello implica que debe recurrirse a métodos iterativos. Es por eso que a estos métodos se los denomina también implícitos a diferencia de los explícitos anteriormente mencionados. Para entender el mecanismo de estos algoritmos, primero repasemos la metodología utilizada en los métodos paso a paso explícitos, hasta ahora vistos. En general, dada una expresión:

$$\frac{dy}{dt} = f\,(t,\ y)$$

con la condición inicial $y_0 = y\ (t_0)$. Utilizando, por ejemplo, el Método de Euler a través de integraciones sucesivas tenemos:

$$y_1 = y_0 + \int_{t_0}^{t_0+h=t_1} f\,(t_0,\ y_0)\ dt$$

$$y_2 = y_1 + \int_{t_1}^{t_1+h} f\,(t_1,\ y_1)\ dt$$

$$\vdots$$

$$y_{i+1} = y_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f\,(t_i,\ y_i)\ dt$$

o sea que

$$y_{i+1} = y_0 + \sum_{n=0}^{i} \int_{t_n}^{t_{n+1}} f\,(t_n,\ y_n)\ dt \qquad (55a)$$

Para una integración que involucra *(k+1)* intervalos que terminan en el punto t_{i+1}, esta última expresión puede escribirse como:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{t_{i-k}}^{t_{i+1}} \Psi_i(t)\ dt \qquad (55b)$$

donde $\Psi_i(t)$ es una función escalonada con ordenadas $f_i = f(t_i, y_i)$ sobre los intervalos semiabiertos $[t_j, t_{j+1}); j = i - k, ..., i$. La integral en la Ecuación (55b) puede asimilarse como el área bajo la curva indicada en la Figura (XIII.4).

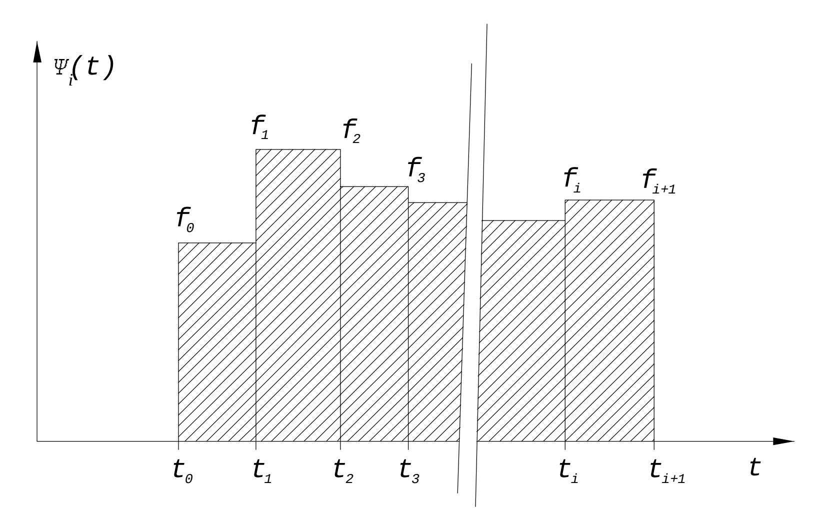


Figura XIII.4: Integración múltiple paso.

Como puede apreciarse, todos los métodos múltiple paso pueden describirse a través de la siguiente ecuación:

$$y_{i+1} = y_{i-k} + \int_{t_{i-k}}^{t_{i+1}} \Phi(t)\ dt \qquad (56)$$

donde Φ es un polinomio de interpolación, que pasa por los puntos (t_i, f_i), apropiado para efectuar la integración aproximada. De esta manera, puede ahora razonarse en un sentido amplio, toda vez que para interpolar polinomios tenemos varias metodologías (Lagrange, Newton, etc.), basadas en general en tres estrategias características para determinar los coeficientes del polinomio de grado p:

$$\Phi = \sum_{n=0}^{p} a_n\ t^n$$

Las mismas son: la interpolación por diferencias hacia adelante, hacia atrás o

centradas. Si se suponen a todos los puntos igualmente espaciados ($\Delta t = h$), cuando nos basamos en diferencias hacia adelante, nos comenzamos en el extremo izquierdo del intervalo (ver Figura (XIII.4)), tomando $\Delta t_1 = (t_1 - t_0)$, $\Delta t_2 = (t_2 - t_1)$, y así sucesivamente.

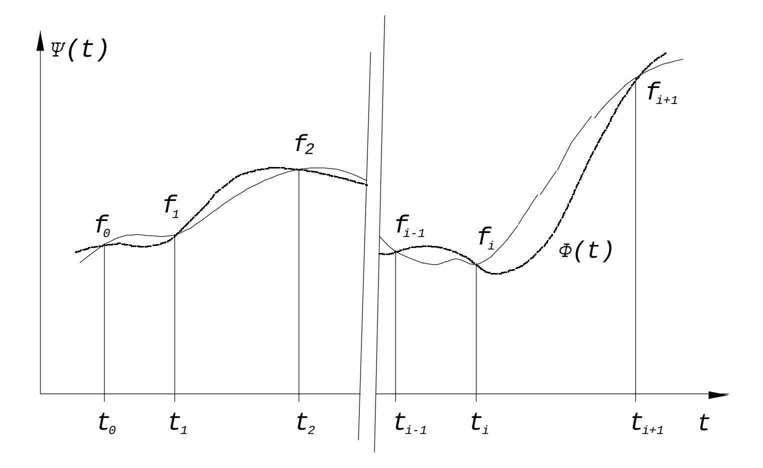


Figura XIII.5: Integración abierta múltiple paso.

Conocidos los puntos $t_0, t_1, \ldots, t_i$, se busca el polinomio que pase por todos los puntos, extrapolando el valor de (t_{i+1}, f_{i+1}) (ver Figura (XIII.5)). A esta fórmula de integración se la conoce como *fórmula de integración abierta*, y es muy sencillo demostrar (aplicando la fórmula de interpolación de Newton para polinomios de grado p) las siguientes expresiones:

Para $p = 3$:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\left(55\, f_i - 59\, f_{i-1} + 37\, f_{i-2} - 9\, f_{i-3}\right) \qquad (57)$$

$$\varepsilon = o(h^5)$$

O bien para $p = 5$:

$$y_{i+1} = y_{i-5} + \frac{3}{10}\, h\left(11\, f_i - 14\, f_{i-1} + 26\, f_{i-2} - 14\, f_{i-3} + 11\, f_{i-4}\right) \qquad (58)$$

$$\varepsilon = o(h^7)$$

Si en cambio utilizamos fórmulas de integración cerradas, el polinomio de interpolación ahora no sólo debe pasar por los puntos conocidos (t_0, t_1, ..., t_i) sino además por (t_{i+1} , f_{i+1}). Aquí utilizamos las fórmulas de diferencias hacia atrás, basándonos en el extremo derecho del intervalo $\Delta t_1 = (t_{i+1} - t_i)$, $\Delta t_2 = (t_i - t_{i-1})$, y así sucesivamente. Nuevamente, es fácil demostrar a partir del procedimiento de Newton para interpolación de un polinomio de grado p usando diferencias finitas (propagación hacia atrás), las siguientes fórmulas para la estimación:

Para $p = 3$:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24} (9 f_{i+1} + 19 f_i - 5 f_{i-1} + f_{i-2})$$

$$\varepsilon = o(h^5) \qquad (59)$$

O bien para $p = 5$:

$$y_{i+1} = y_{i-3} + \frac{2h}{45} (7 f_{i+1} + 32 f_i + 12 f_{i-1} + 32 f_{i-2} + 7 f_{i-3})$$

$$\varepsilon = o(h^7) \qquad (60)$$

Como puede observarse, en estas dos últimas expresiones para el cálculo de y_{i+1}, debemos disponer en el miembro derecho, de los valores de f_{i+1}, que a su vez dependen de y_{i+1}. Esto nos conduce a la necesidad de un método iterativo, que implica más esfuerzo de cálculo, pero permite, en general, reducir el error de integración.

XIII.7 MÉTODOS PREDICTORES-CORRECTORES

Para aplicar los métodos predictores o de interpolación abierta, son necesarios los primeros valores, por ejemplo f_i, f_{i-1}, f_{i-2} y f_{i-3} e y_i en la Ecuación (57). Éstos pueden obtenerse arrancando a partir de la condición inicial $y(t_0)$ por medio de los métodos explícitos de Euler, Runge-Kutta, etc. Generados los primeros valores contiguos al punto inicial o de arranque, puede entonces aplicarse cualquiera de los métodos de interpolación o predictores. En efecto, a partir de los primeros puntos 0, 1, ..., i, se calcula la función en $(i+1)$ sin necesidad de iteraciones (por ejemplo, Ecuaciones (57) o (58)). En cambio, ya vimos, que para utilizar las Ecuaciones (59) y (60) debe recurrirse a métodos iterativos, propios de los métodos implícitos o de interpolación cerrada. Ello implica que debe adoptarse (además de los cálculos que recurren a métodos explícitos para la fase de arranque) un valor inicial para iniciar la serie de iteraciones, el cual puede incidir fuertemente en el tiempo de cómputo y en la posibilidad de convergencia misma. Es por ello que se requiere para la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

aplicabilidad de los métodos implícitos una pertinente manera de inicializar (estimar) el valor de y_{i+1} o f_{i+1}. Una forma inteligente de hacerlo es utilizar los métodos predictores para encontrar un valor (estimación) de y_{i+1}, y tomar a éste como inicialización en un método corrector. Esta estrategia origina una gama de métodos llamados predictores-correctores. Obviamente, estos métodos tienen la ventaja de minimizar el número de iteraciones de los métodos de interpolación cerrada, y además, conservan un error menor que los de interpolación abierta. Sin embargo, implican un número importante de evaluaciones. Como regla general, se considera que en la etapa iterativa (correctora), se deben emplear a la sumo dos o tres iteraciones, por lo que el paso h debe ser lo suficientemente pequeño para lograr buenas estimaciones en la etapa estimativa (predictora), y garantizar una convergencia rápida. Por otro lado, el paso debe ser lo suficientemente largo como para minimizar el error de redondeo acumulado por el número de operaciones a realizar, a la vez de reducir el tiempo de cómputo para cubrir el horizonte de tiempo de integración especificado.

Como veremos en las aplicaciones particulares en el Capítulo XIV, en general, para procesos simples, ya sea descriptos por una ecuación o por un sistema de ecuaciones diferenciales de elevada magnitud, en la mayoría de los casos, los métodos sencillos de un sólo paso (Euler, Runge-Kutta de cuarto orden, etc.) son más que suficientes y compiten muy bien en tiempo de cálculo con los métodos implícitos o los predictores-correctores. Sin embargo, para casos en los cuales un sistema de ecuaciones diferenciales presenta un comportamiento *stiff*, que por definición involucra a variables cuya velocidad de cambio es muy diferente a otras (constantes de tiempo muy diferentes en la dinámica de un sistema físico, por ejemplo), resulta de aplicación indispensable la familia de métodos implícitos, con estrategias predictivas-correctivas (Capítulo XV). En la práctica, es conveniente seleccionar para las etapas correctivas y predictivas algoritmos del mismo orden de error, y además, en la etapa de arranque del método, utilizar valores del incremento h muy pequeños (etapa de estimación de los primeros valores con los cuales disparar el método predictivo), y durante la integración, utilizando criterios como los derivados a partir de fórmulas similares a la Ecuación (55), ir incrementando el paso según sea posible.

Un método predictor-corrector muy conocido es el método de Adams-Moulton, cuya etapa de predicción se calcula de la siguiente forma:

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}\,(55\, f_i - 59\, f_{i-1} + 37\, f_{i-2} - 9\, f_{i-3}) \qquad (61)$$

$$\varepsilon = o(h^5)$$

y la etapa correctora:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}(9\,f_{i+1} + 19\,f_i - 5\,f_{i-1} + f_{i-2})$$
$$\varepsilon = o(h^5) \qquad (62)$$

Existen muchos otros propuestos, tales como el Método de Milne, el de Hamming, etc. Todos ellos se basan en una filosofía general similar a la recientemente bosquejada.

Por otra parte, combinando los principios de los métodos simples de un paso, en los cuales se realiza la evaluación de las derivadas de la función durante el paso de integración, y los de los métodos multipaso, en los cuales se utiliza información de los pasos previos, puede obtenerse una familia de métodos muy potentes. Uno de ellos es muy utilizado, en particular cuando el sistema es *stiff*, conociéndose como Método de Gear. Para profundizar en estos temas se recomienda al lector la literatura referenciada al final del capítulo.

XIII.8 SISTEMAS DE ECUACIONES DIFERENCIALES

Planteamos ahora la solución del siguiente sistema de n ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, con variables independientes y_1, y_2, y_3, ..., y_n:

$$\frac{dy_1}{dt} = f_1(t,\ y_1,\ y_2,\ \dots\ ,y_n)$$

$$\frac{dy_2}{dt} = f_2(t,\ y_1,\ y_2,\ \dots\ ,y_n)$$

$$\vdots \qquad (63)$$

$$\frac{dy_n}{dt} = f_n(t,\ y_1,\ y_2,\ \dots\ ,y_n)$$

con las siguientes condiciones iniciales:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_1 \ (t_0) \ = \ y_1^0$$

$$y_2 \ (t_0) \ = \ y_2^0$$

$$\vdots$$

$$y_n \ (t_0) \ = \ y_n^0$$

Dado que utilizamos para la solución del sistema un algoritmo numérico, cada una de las Ecuaciones (63) podría tratarse en forma independiente, a partir del punto inicial conocido. Más aún, para cada ecuación del sistema, se podría plantear una estrategia (método) de resolución diferente, ya que se aplican en paralelo y simultáneamente, en cada paso de integración. Esto generalmente es válido tanto para los métodos implícitos como explícitos. No obstante, por criterios de practicidad se utiliza en lo posible el mismo método para todo el sistema. En efecto, derivar ecuaciones para estimar una cota de error resulta muy tedioso, y virtualmente imposible. Por otra parte, cuando se utilizan los métodos multipaso, se debe recurrir a métodos iterativos con sistemas de ecuaciones no lineales, con todos los inconvenientes que ello implica, en particular en la convergencia del sistema.

En síntesis, la filosofía es similar, pero ahora todas las etapas del algoritmo implican un álgebra matricial (recordar el análisis del Capítulo IV) para resolver sistemas de ecuaciones no-lineales. Además, la estimación de la cota del error, su dependencia con el paso, la anticipación de estabilidad del método, etc., se complican sustancialmente. En la práctica, se experimenta con distintos pasos a los efectos de verificar la performance del método y optimizar el desempeño del mismo, dado un sistema de ecuaciones a resolver. Cuando se utilizan métodos multipaso, predictores-correctores, en los cuales se plantea el cambio del paso h durante la integración, los criterios para realizarlos son similares a los métodos utilizados para una sola ecuación, pero más dificultosos de aplicar.

Por otra parte, al igual que lo discutido en el Capítulo IV al referirnos a la forma de las matrices de coeficientes de un sistema de ecuaciones de elevada dimensión, que en muchos problemas de ingeniería es rala, (por ejemplo, cascadas múltiple-etapa, elementos estructurales en mecánica, etc.), deben aplicarse todas las técnicas ya discutidas que permitan manipular el sistema y obtener soluciones en pocas iteraciones a los efectos de minimizar el tiempo de cálculo. Esto es sumamente importante en los casos en los cuales el sistema es *stiff* y altamente no-lineal, ya que aquí debe recurrirse a métodos multipaso similares a los discutidos anteriormente.

Por último, cabe recordar que los métodos discutidos en este capítulo no sólo

se aplican a sistemas de ecuaciones diferenciales de primer orden. En efecto, si enfrentamos la solución de un sistema de segundo orden, por ejemplo:

$$\frac{dy^2}{dt} = f\ (y^{/},\ y,\ t) \qquad (64)$$

podemos plantear, mediante sustitución de variables, lo siguiente:

$$\frac{dy}{dt} = u = f\ (u,\ t,\ y) \qquad (65)$$

entonces,

$$\frac{du}{dt} = f^{/}\ (u,\ y,\ t) \qquad (66)$$

Por lo que la Ecuación (64) se ha convertido en el sistema constituido por las Ecuaciones (65) y (66). Este razonamiento es válido cualquiera sea el orden de la ecuación diferencial (64), según vimos en la Sección II.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Encontrar la solución del siguiente problema de valores iniciales, utilizando los primeros cuatro términos de la serie de Taylor, para *t = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 y 1.0*:

$$y^{/} = \frac{1}{2}\ (1 + t)\ y^2$$

$$y(0) = 1$$

P2) Resolver el Problema (1) aplicando el Método de Euler.

P3) Utilizar el Método de Heun (Ecuaciones (43) y (44)) para resolver la EDO del Problema (1) y comparar los resultados obtenidos con los del Problema (2).

P4) Escribir un programa que utilice el Método de Euler para resolver la EDO: $f(t, y) = t + y$ con la condición inicial $y(t_0) = y(0) = 0$. Integrar la ecuación en el intervalo $0 \leq t \leq t_{máx}$ utilizando diferentes tamaños de paso, h. Imprimir

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

los resultados después de *k* pasos (por ejemplo, para $t = t_0$, t_k, t_{2k}, ... ,) y comparar los resultados con la solución analítica.

P5) Reescribir el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias como un sistema de EDO's:

$$\frac{d^3y}{dt^3} = t^2 \, y \, \frac{d^2y}{dt^2} - y \, \frac{dz}{dt}$$

$$\frac{d^3z}{dt^3} = t \, z \, \frac{dz}{dt} + \frac{dy}{dt}$$

P6) Considerar la EDO

$$\frac{dy}{dt} = 100 \, y - 101 \, e^{-t} - 100$$

con la condición inicial *y(0) = 2*. Si se ignoran los errores de redondeo, mostrar que el error de discretización de la solución de esta ecuación mediante el Método de Euler es:

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_i \, (1 + 100 \, h) - \frac{h^2}{2} \, e^{\xi_{i+1}}$$

con $t_i < \xi_i < t_{i+1}$, o

$$\varepsilon_{i+1} = \varepsilon_0 \, (1 + 100 \, h)^i - \frac{h^2}{2} \, [e^{-\xi_i} + (1 + 100 \, h) \, e^{-\xi_{i-1}} + \ldots + (1 + 100 \, h)^{i-1} \, e^{-\xi_i}]$$

Considere la solución de la ecuación en el intervalo $0 \leq t \leq 1$. Investigue la estabilidad del Método de Euler en la solución de la ecuación dada para un error inicial $\varepsilon_0 = 0.0001$ y para diversos tamaños de paso $h = 0.01, 0.001$, etc.

P7) Resolver la EDO del Problema (1) aplicando el Método de Runge-Kutta de 3er. orden (Ecuación (48)). Luego, utilizar el algoritmo de 4to. orden.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Comparar los resultados.

P8) Integrar la EDO:

$$\frac{dy}{dt} - 3t^4 - t + 2 = 0$$

$$con \ y(0) = 0$$

desde $t_0 = 0$ hasta $t_{10} = 5$ utilizando el Método de Runge-Kutta de 3er. orden, con un tamaño de paso $h = 0.5$.

P9) En el Problema (8), estimar un límite superior para el error total en el valor calculado de y para $t_{10} = 5$. Suponer que el error de redondeo es despreciable, esto es, el error total está dado por el error total de truncamiento:

$$\varepsilon_{10} = y_{10} - y(t_{10})$$

P10) Desarrollar una formulación general para los métodos de Runge-Kutta de 4to. orden, comparables al descripto en detalle para los métodos de 2do. orden y delineado para los métodos de 3er. orden. Si se parte de la Ecuación (49) y se expande cada uno de los k_i con $i = 1, 2, 3, 4$ en series de Taylor como función de dos variables y se igualan los coeficientes de cada *potencia de* $h \leq 4$ en la Ecuación (49) con aquellos de la misma potencia de h en la Ecuación (13), ¿cuál es el sistema de ecuaciones que describe a los parámetros de cuarto orden comparable con las Ecuaciones (41) para los métodos de 2do. orden? ¿Cuántos parámetros deben especificarse para determinar un método particular de 4to. orden? Mostrar que las Ecuaciones (50), (51) y (52) satisfacen el sistema de ecuaciones desarrollado previamente.

P11) El Método de Milne es un método predictor-corrector para resolver EDO´s con error de truncamiento de $o(h^5)$. Requiere conocer la solución y y el valor de su derivada y', en los primeros cuatro pivotes, para aplicarlo y continuar la solución del mismo. Estos valores de y pueden obtenerse desarrollando la función en serie de potencias o aplicando alguno de los métodos de Euler o Runge-Kutta. Resolver la EDO del Problema (1) utilizando el algoritmo propuesto por Milne:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$y_{i+1,\,p} = y_{i-3} + \frac{4}{3}\,h\,(2\,f_{i-2} - f_{i-1} + 2\,f_i)$$

$$y_{i+1,\,c} = y_{i-1} + \frac{1}{3}\,h\,(\,f_{i-1} + 4\,f_i + f_{i+1})$$

para $t = 0.4$, *0.5*, *0.6* y *0.7*. Utilizar la solución exacta dada para $t = 0.0$, *0.1*, *0.2* y *0.3*. Comparar los resultados con los obtenidos en los Problemas (1) y (7).

P12) Resolver el sistema de ecuaciones diferenciales:

$$y^{\prime} = y + z$$

$$z^{\prime} = z - y$$

con las condiciones iniciales $y(0) = 0.1$ y $z(0) = 0.2$.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Carnahan, B., H. A. Luther, y J. O. Wilkes, *Applied Numerical Methods*, John Wiley and Sons, Inc., New York (1969).
- Cohen, A. M., J. F. Cutts, R. Fielder, D. E. Jones, J. Ribbans, y E. Stuart, *Análisis Numérico*, Editorial Reverté S. A., Barcelona (1977).
- Hamming, R. W., *Numerical Methods for Scientists and Engineers*, McGraw-Hill, New York (1962).
- Hildebrand, F. B., *Introduction to Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., New York (1956).
- Hornbeck, R. W., *Numerical Methods*, Quantum Publishers, Inc., New York.
- Lapidus, L., *Digital Computation for Chemical Engineers*, McGraw-Hill Inc, New York (1962).
- Luthe, R., A. Olivera y F. Schutz, *Métodos Numéricos*, Editorial Limusa, México (1978).
- Milne, W. E., *Numerical Solution of Differential Equations*, John Wiley and Sons, New York (1953).

- O'Neill, P. V., *Advanced Engineering Mathematics*, 3ra. Ed., Wadsworth, Inc., USA (1991).
- Perry, J. H., *Chemical Engineers Handbook*, McGraw-Hill, USA.
- Ralston, A. y P. Rabinowitz, *First Course in Numerical Analysis*, McGraw-Hill Inc., New York (1978).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XIV

SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS DE PROCESO ELEMENTALES

Por
Nicolás J. Scenna

XIV.1 INTRODUCCIÓN

En los primeros capítulos mencionamos que en general, los problemas de simulación en los cuales se adopta la hipótesis de parámetros concentrados (no nos interesa la variación de las propiedades punto a punto en las direcciones espaciales), involucran la solución de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias (la derivada de la acumulación **-***holdup***-** respecto del tiempo).

En este capítulo exploraremos metodologías para lograr modelos de simulación dinámica de equipos (módulos) característicos de un simulador dinámico de propósito genérico. En general, los módulos son los mismos analizados en el caso de simuladores estacionarios, ya discutidos en los capítulos anteriores. Proceduralmente, los pasos a seguir para plantear los modelos (sistemas de ecuaciones diferenciales) son exactamente los ya vistos en los Capítulos VI, IX y X, pero ahora teniendo en cuenta el término de acumulación en los respectivos balances. Los algoritmos para solucionar numéricamente los sistemas de ecuaciones diferenciales resultantes se han discutido en el Capítulo XIII.

También discutiremos sintéticamente los aspectos vinculados a la arquitectura de un simulador dinámico de propósitos generales. En los Capítulos V y VI vimos que los simuladores modulares secuenciales disponen de una lógica central que permite realizar los pasos necesarios a los efectos de articular los modelos parciales (módulos) para *encadenarlos* (secuencialmente) para resolver el problema total (particionado, rasgado y ordenamiento). Además, hemos visto que en los simuladores secuenciales los módulos son orientados. Esto es, conocidas sus entradas, calculan las salidas; o bien en algunos casos se introduce flexibilidad de forma de lograr combinaciones de sentidos de flujo de información (corrientes), con el objeto de minimizar el número de iteraciones globales para resolver el sistema de ecuaciones que representa la planta completa. Se logra así mayor flexibilidad.

En el caso del sistema de ecuaciones diferenciales asociado a la planta completa, y su relación con los subsistemas parciales, asociados a cada módulo, la vinculación es totalmente diferente. En primer lugar hemos observado que numéricamente, si por ejemplo usamos un método explícito para resolver un sistema de ecuaciones diferenciales, se nos pide conocer el miembro derecho instante a

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

instante, a partir de cuyo valor, pueden obtenerse las variables diferenciales (miembro izquierdo) en el instante posterior. En el miembro derecho están contenidas tanto las variables asociadas a las *corrientes de entrada* como las de *salida*, como veremos en los ejemplos de diversos módulos.

Dentro de este contexto, cada reciclo físico en la planta involucra, en el sistema de ecuaciones algebraicas asociado, potenciales variables de iteración. En simulación dinámica, el problema radica en poder calcular, para cada instante, el miembro derecho a partir de los valores calculados de las variables diferenciales (las que figuran en el miembro izquierdo). Por lo tanto, la necesidad de iterar o no para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas simultáneas que conforma el miembro derecho depende de cada caso, y debe recurrirse a ello necesariamente si adoptamos un método de integración de la familia predictores-correctores o implícitos. Aquí vemos el primer requisito a cumplir por la lógica central: Una vez que se dispone del sistema de ecuaciones diferenciales, dadas las variables diferenciales, encontrar un procedimiento (no iterativo si es posible), para resolver el sistema de ecuaciones que resulta. Para el encadenado de los módulos, basta con utilizar la información que indica que las corrientes de salida de un módulo son las entradas del siguiente. Con ese dato, puede construirse, a partir de los módulos individuales, el sistema de ecuaciones diferenciales global.

Puede observarse que la mayoría de los simuladores dinámicos en el mercado responden a la filosofía global u orientada a ecuaciones. Esto es así debido a las características mencionadas más arriba, esto es, la arquitectura orientada a ecuaciones permite fácilmente el planteo de los métodos de resolución de ecuaciones diferenciales, mediante la aplicación de las técnicas vistas en el Capítulo IV.

A continuación analizaremos el problema de construir el modelo asociado a diversos módulos que existen por lo general en los simuladores comerciales. Como hemos resaltado anteriormente, éstos son los mismos que aquellos existentes en los simuladores estacionarios de propósito general. Este planteo facilita la comprensión y permite comparar los modelos y las formas de resolución para los módulos correspondientes al estado estacionario o dinámico. Debe recordarse aquí que si bien pueden escribirse las ecuaciones para cada módulo, basta con conocer las conexiones en el DFI para obtener, a partir de ellas, ligando las variables pertenecientes a las corrientes de entrada/salida de cada módulo, el sistema de ecuaciones global, esto es, el de la planta completa. Además, haciendo el término de acumulación igual a cero, se pasa del modelo dinámico al estacionario. Ello es lo que hace atractiva la arquitectura orientada a ecuaciones, ya que *ambos* simuladores pueden *coexistir* en forma sencilla y operativa, dentro de una *estructura global* que los contenga.

Para lograr un desarrollo coherente con lo que se ha estudiado, se plantearán en los siguientes capítulos modelos dinámicos pertenecientes a módulos para simulación en estado estacionario ya estudiados (equipos de separación múltiple etapa en contracorriente, evaporación flash, etc.), a los efectos de apreciar la diferencia entre ambos modelos. Sin embargo, también hemos remarcado a lo largo de todos los

capítulos anteriores que cualquiera sea el simulador comercial a disposición, siempre existirá la necesidad de recurrir a módulos particulares. Es por ello que los mismos permiten que el usurario incorpore diversos modelos propios, tanto módulos de equipos como métodos de estimación de propiedades fisicoquímicas. Esto nos lleva a destacar, al igual que lo hiciéramos para el caso estacionario, la importancia de lograr habilidad para desarrollar modelos específicos, ahora dinámicos.

Para ejemplificar este último punto, en el Capítulo XVII analizaremos modelos de equipos específicos que en general no se disponen normalmente en simuladores comerciales. Para ello, entre otros ejemplos, continuaremos con el problema planteado en el Capítulo II (desalación de aguas de mar por el método de evaporación flash múltiple efecto), de tal forma de lograr simultáneamente la comparación entre modelos estacionarios y dinámicos y discutir además diversas aplicaciones prácticas de un simulador de este tipo. Por último, en el Capítulo XVIII analizaremos el caso de un biodigestor para el tratamiento de efluentes líquidos. Se discutirán los puntos a considerar durante el desarrollo de un módulo de simulación dinámica de un equipo como el planteado, que al contrario de los módulos de destilación, por ejemplo, no pueden generalizarse fácilmente para cualquier tipo de efluentes a tratar. Estos ejemplos tienen el claro objetivo de mostrar las limitaciones de un simulador de *propósito general* cuando en la tarea cotidiana nos enfrentamos con distintos tipos de problemas.

En lo que sigue analizaremos los sistemas de ecuaciones diferenciales que resultan al plantearse módulos de simulación dinámica para diversos equipos sencillos.

XIV.2 SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS SENCILLOS DE PROCESO

En esta sección analizaremos, en orden creciente de complejidad, y a través de ejemplos consecutivos, diversos modelos de simulación dinámica.

Ejemplo 1: *Tanque abierto con flujo de salida gravitatorio*.

Un esquema del sistema bajo análisis se muestra el la Figura (XIV.1).

Hipótesis asumidas:

- Sistema adiabático
- Densidad constante
- No hay reacción química
- Se desprecia la evaporación.

Balance de materia:

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E_1 + E_2 - S \qquad (1)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde E_1 y E_2 representan los caudales volumétricos de entrada, S el caudal volumétrico de salida y A_T el área transversal del tanque, supuesto cilíndrico (área constante con la altura).

Dado que la densidad del líquido es constante, se han dividido ambos miembros por la misma a los efectos de plantear la acumulación volumétrica de fluido.

Suponemos que conocemos los caudales de entrada. Estos son constantes (es decir perfectamente controlados). El caudal de salida en cambio depende de la altura, a partir de la ecuación que se obtiene de la expresión de Bernoulli; en efecto, la velocidad de salida puede expresarse como:

$$v_s(t) = \sqrt{2\ g\ h(t)} \qquad (2)$$

donde g es la aceleración de la gravedad y $h(t)$ la altura de líquido por encima del orificio de salida. Por lo tanto, el caudal volumétrico a la salida, $S(t)$, se obtiene de la siguiente expresión:

Figura XIV.1: Esquema de un tanque abierto, flujo de salida gravitatorio.

$$S(t) = A_s\ v_s(t) \qquad (3)$$

donde A_s es el área del orificio de salida.

Dadas las expresiones para el cálculo del miembro derecho en función de la variable diferencial $h(t)$, la solución de la Ecuación (1) es directa por cualquiera de los métodos discutidos en el Capítulo XIII, por ejemplo Euler, luego de especificar la condición inicial $h = h_0$ en $t = t_0$.

Ejemplo 2: Tanque abierto con descarga regulada por una válvula.

A continuación suponemos que el tanque genérico del Ejemplo (1) ahora descarga por gravedad, pero regulado por la acción de una válvula (según el esquema indicado en la Figura (XIV.2)). El caudal E se supone conocido y constante.

Hipótesis:

- Los efectos energéticos son despreciables
- La densidad es constante
- Evaporación despreciable
- No hay reacción química

Balance de materia:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E - S \qquad (4)$$

donde E y S son el caudal volumétrico de entrada y salida, respectivamente y A_T el área de la base del tanque (supuesta constante con la altura del mismo).

Para resolver este sistema, al igual que el caso anterior, se debe asumir una condición inicial: $t = t_0$, $h = h(t_0)$. Si el estado inicial es estacionario, la altura $h(t_0)$ es tal que genera una corriente de salida $S(t_0)$ igual a la entrada E. De lo contrario, la altura y caudal de salida evolucionarán hasta el nuevo estado estacionario.

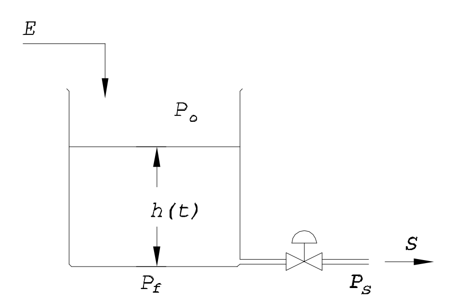


Figura XVI.2: Esquema de un tanque abierto, salida a través de una válvula manual.

Si suponemos que E es constante y conocido, sólo resta calcular $S(t)$. Podemos suponer una relación genérica del flujo y la constante característica de la válvula, C_v, según la expresión generalizada:

$$S = C_v \sqrt{\Delta p} = C_v \sqrt{(P_f - P_s)} \qquad (5)$$

Dado que el tanque se supone abierto, y descarga a la atmósfera, la caída de presión entre ambos puntos es simplemente la altura h de líquido, expresado en las unidades correspondientes. Por lo tanto:

$$S = C_v\, f \sqrt{h(t)} \qquad (6)$$

donde f es un factor que considera el cambio de unidades respectivo para homogeneizar dimensionalmente la ecuación. Luego, dada la condición inicial, instante a instante, se puede determinar $S(t)$, y por lo tanto $h(t)$, para el intervalo de tiempo dado. En efecto, dado un valor $h(t_0)$ y aplicando el método de Euler por ejemplo, pueden calcularse la altura $h(t)$ y el caudal $S(t)$ para el intervalo de tiempo especificado, a partir de la Ecuación Diferencial (4).

Ejemplo 3: Tanque abierto, alimentación en la base.

Figura XVI.3: Esquema de un tanque abierto, entrada y salida a través de válvulas manuales.

Ahora suponemos un

tanque al cual se lo alimenta desde la base, según el esquema, indicado en la Figura (XIV.3), donde se asumen conocidas la presión de entrada, P_e, y la presión de salida, P_s, supuestas constantes.

El conjunto de hipótesis es similar al caso anterior. Luego, por el *balance de materia* se tiene:

$$A_T \frac{d}{dt} h(t) = E - S \tag{7}$$

donde E y S pueden calcularse según:

$$E = C_{v_1} f \sqrt{(P_e - P_f)} \tag{8}$$

$$S = C_{v_2} f \sqrt{(P_f - P_s)} \tag{9}$$

$$P_f = P_o + \rho_l \, g \, h(t) \tag{10}$$

con P_o, P_e y P_s datos; ρ_l densidad del fluido y g aceleración gravitatoria.

Conocido $h(t)$ en cualquier instante podemos calcular P_f, y por lo tanto $S(t)$. Luego, a partir de la Ecuación Diferencial (7) puede calcularse $h(t + \Delta t)$ para todo valor del tiempo hasta llegar al especificado utilizando un valor Δt conveniente. Obviamente, asumimos que se utiliza un método explícito para resolver la ecuación diferencial que describe el comportamiento del sistema, que para casos sencillos como estos resulta lo más adecuado.

Ejemplo 4: Tanque cerrado.

Una ligera complicación se presenta cuando se tiene un recipiente cerrado, según lo indicado en la Figura (XIV.4). Aquí la presión de la fase vapor P_v no es constante (diferente de la atmosférica), sino que puede variar y debe calcularse instante a instante, ya que de haber una masa de gas retenida importante, varía con el volumen de la cámara disponible para el gas.

Generalmente se plantean dos opciones. En una se asume *holdup* de vapor despreciable y por lo tanto la presión de la fase vapor surge de plantear la relación de equilibrio (ya sea mezcla multicomponente o un sólo componente).

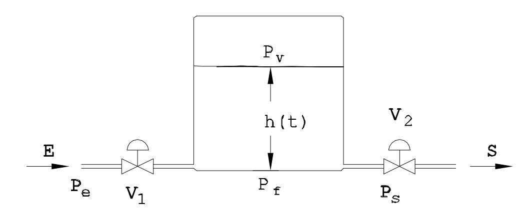


Figura XVI.4: Esquema de un tanque cerrado.

El otro camino supone que la masa retenida en el volumen para el gas no es despreciable (sea constante o no)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

y por lo tanto, la presión surge de un cálculo de aplicar una ecuación de estado (ya sea la ley de los gases ideales o bien otra más realista). En este caso, necesitamos tanto el volumen disponible para el gas/vapor como la masa y la temperatura del mismo. Esta última puede adoptarse igual a la del líquido si consideramos despreciable el aumento o disminución de energía interna en el gas debido al trabajo de expansión/compresión.

Ejemplo 4a: Holdup de vapor despreciable.

Para el caso en que consideramos *holdup* de vapor despreciable sólo debe evaluarse la presión de vapor, $P_v = P_{vs}$. La temperatura del vapor, T_G, podemos asumirla en equilibrio térmico con la del líquido (temperatura de ambas fases iguales). Por lo tanto, dado la temperatura del líquido, la presión de vapor de equilibrio puede calcularse utilizando cualquiera de las correlaciones disponibles, por ejemplo, Antoine (ver Capítulo VII).

Una vez disponible la presión en la fase vapor, los cálculos a realizar son equivalentes al ejemplo anterior. En efecto, sólo nos resta evaluar, para cada instante, dada la presión de vapor, $P_{vs} = f(T_G)$, los caudales correspondientes. A partir de los mismos puede evaluarse $h(t + \Delta t)$ instante a instante, hasta alcanzar el valor de tiempo especificado.

Ejemplo 4b: Holdup de vapor no despreciable y constante.

Si en cambio consideramos importante la masa de vapor retenida (masa constante y conocida), entonces podemos evaluar por medio de una ecuación de estado (supongamos gas perfecto) la presión en la fase vapor:

$$P_v = n\ R\ T_G/V_G \tag{11}$$

El problema ahora es determinar V_G. Dado que asumimos para el vapor una expansión isotérmica (T_G constante), la masa evaporada despreciable (*holdup* de vapor (n) constante) y equilibrio térmico líquido-vapor, esto es, conocemos T_G, el volumen ocupado por el vapor, V_G, es la única variable y es igual al volumen total del tanque, V_T, menos el del líquido.

$$V_G = V_T - A_T\ h(t) \tag{12}$$

Recordar que asumimos que el área transversal del tanque, A_T, es constante.

Determinado P_v, todos los cálculos que deben realizarse son similares a los ya vistos en los ejemplos anteriores.

Si la expansión del gas no fuera isotérmica, la variación de la temperatura con el volumen deberá ser tenida en cuenta, ya que el trabajo de compresión del gas se convierte en variación de energía interna y existen casos en los cuales este factor no es despreciable.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Por otra parte, si existiera una caída de presión importante en la válvula de entrada, o bien se calienta el contenido líquido del tanque, entonces la evaporación del líquido podría no ser despreciable, y por lo tanto, debe plantearse la variación del *holdup*, tanto en la fase líquida como en la fase vapor.

Ejemplo 5: Evaporación en tanque cerrado.

Consideremos ahora un ejemplo en el cual se introduce calor a través de una camisa calefactora a un recipiente cerrado, del cual se extrae la corriente vapor producida a través de una cañería regulada por una válvula (el vapor se forma a partir de la ebullición del líquido), según el esquema indicado en la Figura (XIV.5).

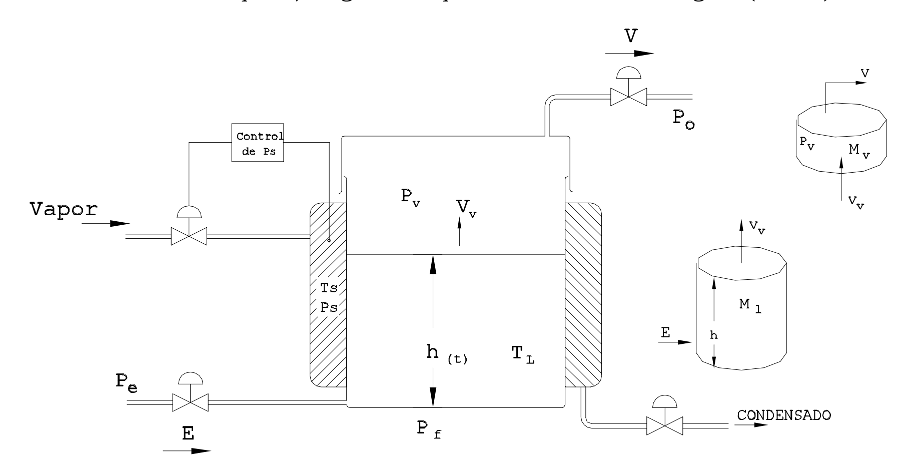


Figura XVI.5: Evaporación en un recipiente cerrado con calefacción.

Hipótesis:

- La caída de presión del líquido a través de la válvula no genera cambio de propiedades apreciables en el mismo.
- Líquido perfectamente mezclado.
- Se supone que la densidad de líquido es constante, pese a la variación de temperatura.
- Se desprecian las pérdidas calóricas a través de las paredes del recipiente y/o cañerías
- Se supone un *control perfecto* de la presión de vapor de calefacción, P_s, a la cual le corresponde la temperatura de saturación T_s.
- Se supone que no existe reacción química.

Asumimos equilibrio térmico entre el líquido y el vapor. A partir de estas hipótesis se plantean los balances de energía y materia:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Balance de energía:

$$\frac{d}{dt}(M_l \; HL) = Q + \rho_l \; E \; HL - V_v \; HV \tag{13}$$

donde M_l es el *holdup* de líquido, E caudal volumétrico y V_v caudal másico.

Balance de materia, fase vapor:

$$\frac{dM_v}{dt} = V_v - V \tag{14}$$

donde V es el caudal másico de vapor a la salida del tanque, V_v el caudal másico de vapor que abandona la fase líquida y M_v el *holdup* de vapor.

Balance de materia de la fase líquida:

$$\rho_l \; A_T \; \frac{d}{dt} \; h(t) = \rho_l \; E - V_v \tag{15}$$

Si utilizamos un método explícito para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales, que por otra parte son apropiados para estos casos (y ventajosos ya que requieren menor tiempo de cómputo), dado el valor de las variables diferenciales, debemos calcular el miembro derecho. Para ello deben utilizarse las siguientes relaciones, que permiten determinar las variables que necesitamos:

$$Q = U \; A_h \; (T_s - T_L) \tag{16}$$

donde el área de calefacción, A_h, se supone constante, pese a que puede variar con la altura del líquido en el tiempo, T_s es la temperatura de condensación del vapor y T_L la temperatura del líquido.

La masa de líquido retenida en cada tiempo resulta:

$$M_l = A_T \; h(t) \; \rho_l \tag{17}$$

de donde, a partir del contenido entálpico total, $M_l \; HL$, se obtiene la entalpía específica (por división) y a partir de la misma, la temperatura de líquido, T_L. Conocida la temperatura del líquido, podemos calcular el calor transferido.

El caudal de entrada E puede calcularse como en los ejemplos anteriores; por ejemplo, conocida la presión en el fondo del tanque, P_f, tenemos:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$E = C_v \, f \sqrt{(P_e - P_f)} \tag{18}$$

$$P_f = P_v + \rho_l \, g \, h(t) \tag{19}$$

El cálculo de la masa evaporada puede realizarse a partir de la relación que nos indica que el caudal de vapor es proporcional a la diferencia de presión entre la presión de vapor del líquido, P_{vs}, que es función de la temperatura T_L y la presión de la fase vapor en el tanque, P_v.

$$V_v = K \, (P_{vs} - P_v) \tag{20}$$

En general, la constante K (pseudo-coeficiente de transferencia de materia) se fija en un valor muy grande de tal forma de lograr que P_v tienda a P_{vs}. A medida que usamos un valor más pequeño, podemos visualizar el efecto del no equilibrio en la evaporación, ya que progresivamente la presión en el tanque se diferencia de la de equilibrio. Como ya mencionamos, P_v se calcula según:

$$P_v = n \, R \, T_G / V_G \tag{21}$$

donde V_G es el volumen de la cámara de gas, que puede obtenerse restando el volumen del líquido al volumen total del tanque y el número de moles surge directamente a partir del holdup de vapor, M_v.

Para la ecuación anterior, se considera que la fase vapor tiene la misma temperatura (T_G) que el líquido (T_L), que es conocida (equilibrio térmico).

El caudal másico de vapor que abandona el tanque (V) puede calcularse a través de la funcionalidad que vincula a éste con la caída de presión a través de la válvula según el tipo especificado, por ejemplo:

$$V = C_v \sqrt{\frac{(P_v - P_0)}{\rho_v}} \tag{22}$$

donde C_v es la constante característica de la válvula con las unidades dimensionales adecuadas y ρ_v es la densidad del vapor.

Ejemplo 6: Reactor tanque agitado con intercambio de calor.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En este ejemplo analizaremos un reactor tanque agitado mezcla perfecta, con una reacción de primer orden, exotérmica, por lo que se requiere enfriamiento que es provisto por una camisa por la cual circula un caudal volumétrico de agua de proceso, A_e.

El sistema se indica esquemáticamente en la Figura (XIV.6).

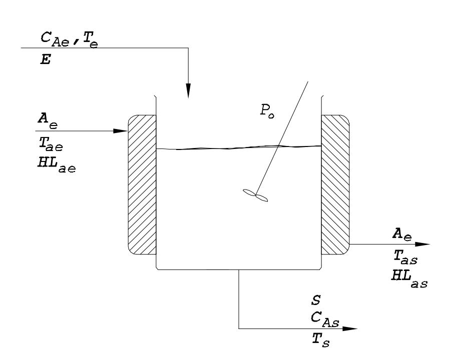


Figura XVI.6: Reactor tanque agitado con agua de enfriamiento.

Hipótesis:

- Reactor tanque ideal mezcla perfecta.
- Densidad del líquido constante (independiente de la temperatura y de la composición).
- No existen pérdidas calóricas a través de las paredes.
- Líquido de enfriamiento perfectamente mezclado en camisa.
- Área y coeficientes de transferencia de calor constantes.

Balance de materia:

$$\frac{dV_l}{dt} = E - S \tag{23}$$

donde V_l es el volumen de líquido retenido en el reactor.

Balance de materia para el reactante A:

$$\frac{d}{dt}(V_l\, Ca_s) = E\, Ca_e - S\, Ca_s - V_l\, k\, Ca_s \tag{24}$$

donde k es la constante cinética, función de la temperatura de líquido según:

$$k = k_0 \exp(-\Delta H_r / R\, T_L) \tag{25}$$

donde ΔH_r representa el calor de reacción.

Balance de energía:

$$\rho_l \frac{d}{dt}(V_l\, HL) = \rho_l\, E\, HL_e - \rho_l\, S\, HL_s + (V_l\, k\, Ca_s)\, \Delta H_r - UA_h\, \Delta T_m \tag{26}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde ΔT_m es la diferencia media logarítmica para la transferencia de calor.

Se suponen conocidas las presiones de contorno, por lo cual son calculables los caudales *E* y *S*, a partir de los gradientes de presiones y los dispositivos que correspondan, según vimos en ejemplos anteriores. A_e se supone conocida.

Para el cálculo de la concentración Ca_s debemos conocer la temperatura del líquido (ya que *k* es función de la misma). Ésta surge de la ecuación diferencial del balance de energía. Aquí debemos considerar el calor de reacción ΔH_r, que por lo general también depende de la temperatura. Se supone la funcionalidad provista como dato. Por último se debe calcular la diferencia media efectiva para la transferencia de calor. La ecuación algebraica para el cálculo de la diferencia ΔT_m resulta:

$$\Delta T_m = \frac{(T_L - Ta_s) - (T_L - Ta_e)}{\ln (T_L - Ta_s) / (T_L - Ta_e)} \qquad (27)$$

En esta expresión no conocemos Ta_s, por lo que deben agregarse nuevas relaciones o nuevas hipótesis. Planteando la dinámica de la entalpía retenida en la masa de agua de enfriamiento, se tiene:

$$\rho_a \, V_a \, \frac{d}{dt} (HL_{as}) = U \, A_h \, (T_L - Ta_s) + \rho_a \, A_e \, (HL_{ae} - HL_{as}) \qquad (28)$$

donde Hl_{ae} es la entalpía del agua de enfriamiento en la entrada, Hl_{as} la entalpía en la salida, A_e es el flujo volumétrico (se supone *holdup* de agua de enfriamiento constante) y ρ_a la densidad del agua (supuesta constante). A partir de esta ecuación, al obtener la entalpía específica del agua de enfriamiento a la salida (igual a la de la camisa de enfriamiento por la hipótesis de mezcla perfecta), podemos calcular la temperatura, Ta_s. Con la misma, y las hipótesis asumidas, podemos calcular el calor transferido, para ser utilizado en la Ecuación (26). Además, si suponemos que el líquido en la camisa de enfriamiento se encuentra perfectamente mezclado y su masa es constante (se supone *holdup* de agua de enfriamiento constante), luego la ecuación (27) se simplifica, ya que el agua de enfriamiento tendrá una temperatura global única, la de salida, que resulta desconocida.

$$Q = U \, A_h \, (T_L - Ta_s) = U \, A_h \, \Delta T_m \qquad (29)$$

Por último, resulta interesante aclarar que dado que existe una reacción química, la velocidad con que el componente *A* desaparece implica la aparición de otros componentes. En este caso, se supone que sólo estamos interesados en seguir la evolución del componente *A* en la corriente de salida y además, que las propiedades no se alteran demasiado por las variaciones en composición, asumiendo, por ejemplo, que reactante y productos se encuentran sumamente diluidos. Si se conoce la estequiometría de la reacción, puede fácilmente plantearse un balance de materia para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

cada componente.

Ejemplo 7: Tanques en serie.

En este ejemplo nos interesa mostrar la forma en que se acoplan las ecuaciones diferenciales, formando un sistema de elevada dimensión, a medida que se incrementa el número de elementos interconectados. Sea, por ejemplo, el sistema indicado en la Figura (XIV.7), en la cual se esquematiza un arreglo de tres tanques en serie, tomados cada uno en forma similar al descripto en el Ejemplo (4), por lo que las hipótesis asumidas son las mismas que en el mencionado ejemplo.

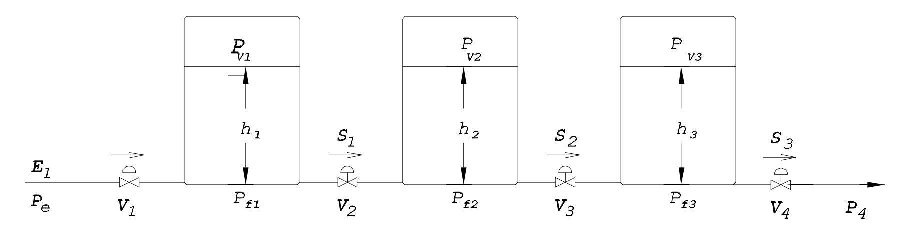


Figura XVI.7: Sistema con tres tanques en serie.

Aquí nuevamente, por condiciones de contorno suponemos que P_e y P_4 son conocidas y constantes.

Balance de materia para cada tanque:

$$A_{T_1} \frac{d}{dt} h_1(t) = E_1 - S_1 \tag{30}$$

$$A_{T_2} \frac{d}{dt} h_2(t) = S_1 - S_2 \tag{31}$$

$$A_{T_3} \frac{d}{dt} h_3(t) = S_2 - S_3 \tag{32}$$

Nuevamente, dados los valores de h_1, h_2 y h_3 se deberán calcular todas las demás variables. Esto impone, en el caso general, para resolver el sistema de ecuaciones del miembro derecho, un procedimiento de particionado, rasgado y ordenamiento, tal cual como lo vimos en el Capítulo IV, de tal manera de lograr una secuencia de resolución acíclica. En efecto, sabemos que ahora existen ecuaciones acopladas del siguiente modo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$E_1 = C_{v_1}\, f\, \sqrt{(P_e - P_{f_1})} \qquad (33)$$

$$P_{f_i} = P_{v_i} + \rho_l\, g\, h_i \quad ; \quad i = 1,\, 2,\, 3 \qquad (34)$$

$$S_1 = C_{v_2}\, f\, \sqrt{(P_{f_1} - P_{f_2})} \qquad (35)$$

$$S_2 = C_{v_3}\, f\, \sqrt{(P_{f_2} - P_{f_3})} \qquad (36)$$

$$S_3 = C_{v_4}\, f\, \sqrt{(P_{f_3} - P_4)} \qquad (37)$$

$$P_{v_i} = \frac{n_i\, R\, T_{G_i}}{V_{T_i} - A_{T_i}\, h_i} \quad ; \quad i = 1,\, 2,\, 3 \qquad (38)$$

donde n_i (número de moles de gas) es constante y dato y T_{G_i} se asume igual a la temperatura del líquido.

Este ejemplo nos brinda varias conclusiones. En primer lugar, el número de ecuaciones se incrementa rápidamente, al aumentar el número de elementos del arreglo. Sin embargo, las ecuaciones pueden expresarse genéricamente utilizando índices, cuya sola función es ayudar a individualizar el tipo de variable (caudal, presión, etc) y la etapa o elemento de la cascada, como vimos en el Capítulo X para torres de destilación.

Queda claro que al complicar el sistema, por ejemplo si se necesitara plantear el balance de energía, o bien existieran múltiples reacciones químicas, aparecen nuevas ecuaciones acopladas, incrementando el número y complejidad de las mismas, que deben resolverse simultáneamente. Si además consideramos que existen casos en los cuales se introducen expresiones fuertemente no lineales (por ejemplo la diferencia de temperatura media logarítmica, la necesidad de utilizar ecuaciones de estado mucho más complicadas que la de los gases perfectos, el cálculo de la entalpía considerando los calores de mezcla, el equilibrio en mezclas multicomponentes, etc.), resulta evidente la posibilidad de la existencia de una secuencia de resolución cíclica, y por lo tanto la necesidad de plantear un método algorítmico para minimizar el número de variables iteradoras a emplear, según lo visto en el Capítulo IV. Dado que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

para sistemas muy grandes el tiempo de cómputo empleado es importante, minimizar el esfuerzo de cálculo al resolver el miembro derecho resulta imperioso, ya que se debe calcularlo instante a instante, a lo largo de todo el intervalo de integración.

Resumiendo, el objetivo es lograr encontrar una secuencia acíclica, esto es, sin variables de iteración a los efectos de minimizar el tiempo de cálculo. Si bien en el ejemplo propuesto ello es posible, no siempre resulta de esa manera, especialmente si se incorporan expresiones fuertemente no lineales.

Por otra parte, hasta aquí se ha supuesto que el modelo ha sido adecuadamente planteado desde el punto de vista de los grados de libertad del sistema, esto es, que el número de ecuaciones es igual al de incógnitas. Como se ha visto en el Capítulo IX, este aspecto es lo primero que debe analizarse al plantearse un modelo.

La complicación en la solución del sistema de ecuaciones algebraicas puede observarse a partir de los próximos ejemplos. Suponga que parte de las corrientes que salen de los respectivos tanques se bifurcan, por alguna necesidad específica del proceso bajo análisis, según el arreglo indicado en la Figuras (XIV.8).

Ejemplo 8: Sistemas con reciclos o bifurcaciones.

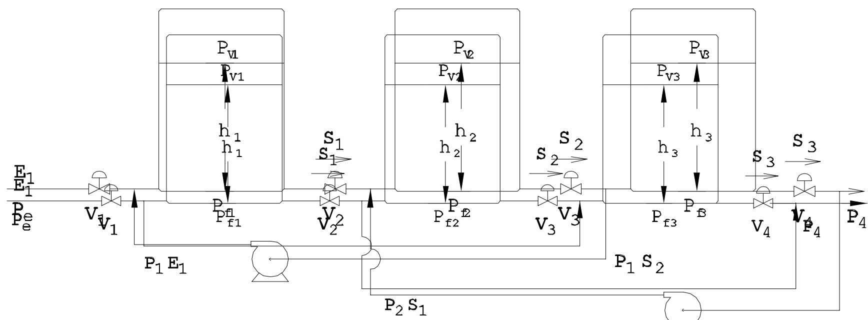


Figura XIV.8a: Sistema con tres tanques en serie con bifurcaciones.
Figura XIV.8b: Sistema con tres tanques en serie con reciclos.

En la Figuras (XIV.8a) y (XIV.8b) *P* es un parámetro que indica el porcentaje de la corriente derivada. Por lo tanto, PE_1 significa por ejemplo, si $P = 0.5$, que la mitad de la corriente E_1 se bifurca según lo expresa el diagrama. También podrán plantearse esquemas con reciclos, aunque en este caso, debido al gradiente de presiones, recircular una corriente implicaría utilizar una bomba que facilite el flujo en el sentido contrario a la caída de presión (ver Figura (XIV.8b)). La consecuencia natural de este *reciclo de información*, es que todas las ecuaciones en sus miembros derechos, tendrán muchas variables también pertenecientes a las otras. En el sentido matricial, esto significa que en vez de concentrarse las variables en la diagonal o en una banda simétrica a ella (la etapa anterior, la actual y la que le sigue en la cascada), y el resto de la matriz con valores nulos, ahora existe una gran dispersión de variables.

Ello implica, fijado un conjunto de variables diferenciales, una mayor probabilidad en la necesidad de utilizar métodos iterativos para resolver el sistema de ecuaciones algebraicas que corresponde al miembro derecho, una vez dados los valores de las variables diferenciales al tiempo *t*, para calcular el correspondiente valor de las variables en el instante posterior.

Además, como se comentó en el Capítulo XIII, no es ésta la única razón por la cual aparece la necesidad de utilizar métodos iterativos en la solución del sistema de ecuaciones que conforma el miembro derecho. Esto sólo es así, si se supone que se utilizan métodos explícitos para la resolución de las ecuaciones diferenciales, esto es, aquellos que calculan el valor de la variable diferencial en el tiempo $t+\Delta t$, sólo a partir de los valores conocidos de las variables diferenciales al instante *t*.

Todos estos métodos (los supuestos hasta este punto) son en general muy efectivos para los problemas aquí tratados, si se utilizan valores del incremento Δt muy pequeños, cuyo esfuerzo de cálculo para recorrer todo el intervalo de integración se compensa con creces al evitar la estrategia iterativa propia de los métodos implícitos. Sin embargo, en sistemas más complicados, por ejemplo con ecuaciones fuertemente no lineales, o bien con constantes de tiempo entre variables muy diferentes entre sí (sistemas *stiff* como veremos en el capítulo siguiente), resultará necesario utilizar métodos numéricos implícitos para la resolución de las ecuaciones diferenciales correspondientes. Esto de por sí introduce la necesidad de recurrir a métodos iterativos para resolver el sistema de ecuaciones algebraico que resulte, según lo discutido en el Capítulo XIII.

Para nuestro ejemplo de la Figura (XIV.8a) el sistema a resolver resulta:

$$A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 \, (1 - P_1) - S_1 \qquad (39)$$

donde las expresiones Φ indican simbólicamente la función correspondiente.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Paralelamente, para el sistema de la Figura (XIV.8b), resulta:

$$A_{T_1} \frac{dh_1}{dt} = E_1 + P_1 S_2 - S_1 \tag{48}$$

$$A_{T_2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 (1 - P_2) - S_2 \tag{40}$$

$$A_{T_2} \frac{dh_2}{dt} = S_1 + P_2 S_3 - S_2 \tag{49}$$

$$A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 + P_1 E_1 - S_3 \tag{41}$$

$$E_1 = \Phi(P_e , P_{f_1}) \tag{42}$$

$$S_1 = \Phi(P_{f_1} , P_{f_2}) \tag{43}$$

$$S_2 = \Phi(P_{f_2} , P_{f_3}) \tag{44}$$

$$S_3 = \Phi(P_{f_3} , P_4) \tag{45}$$

$$P_{f_i} = \Phi(h_i , P_{v_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \tag{46}$$

$$P_{v_i} = \Phi(n_i , T_{G_i} , V_{G_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \tag{47}$$

$$A_{T_3} \frac{dh_3}{dt} = S_2 (1 - P_1) - S_3 \tag{50}$$

$$E_1 = \Phi(P_e , P_{f_1}) \tag{51}$$

$$S_1 = \Phi(P_{f_1} , P_{f_2}) \tag{52}$$

$$S_2 = \Phi(P_{f_2} , P_{f_3}) \tag{53}$$

$$S_3 = \Phi(P_{f_3} , P_4) \tag{54}$$

$$P_{f_i} = \Phi(h_i , P_{v_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \tag{55}$$

$$P_{v_i} = \Phi(M_i , T_{G_i} , V_{G_i}) \quad ; \quad i = 1, 2, 3 \tag{56}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo:

Si damos valores a las constantes correspondientes al proceso indicado en la Figura (XIV.7), obtenemos un sistema de ecuaciones diferenciales (que surgen de las Ecuaciones (30) a (38)), que como comentamos, puede ser resuelto por medio de métodos explícitos como los de Euler o Runge-Kutta de 4to. orden, entre otros. Sea por ejemplo el siguiente conjunto de parámetros para los tanques 1, 2 y 3, respectivamente: $A_T = 5\ m^2$, $V_T = 10\ m^3$ (tanques iguales), $Pe = 8.\ 10^4\ kg/cm^2$, $C_{v1} f = C_{v2} f = C_{v3} f = C_{v4} f = 10^{-3}\ m^4/min\ kg^{1/2}$, $\rho = 1000\ kg/m^3$, $n_1 = n_2 = 120$ mol, $n_3 = 300$ mol, $P_4 = 10^{4}\ kg/cm^2$. Si adoptamos como valores iniciales para las variables diferenciales, por ejemplo los siguientes, $h_{1,0} = 1.6$ m, $h_{2,0} = 1.6$ m, $h_{3,0} = 1$ m), podemos calcular la evolución de todas las variables según se indica en las siguientes figuras.

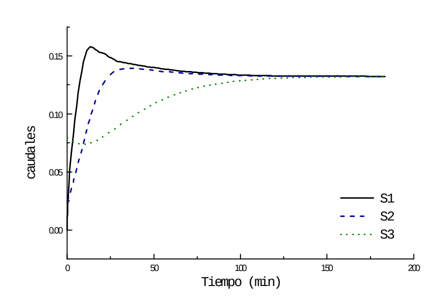


Figura XIV.9: Evolución temporal de los caudales a partir de una inicialización cualquiera.

La Figura (XIV.9) muestra la evolución de los caudales en los respectivos tanques en función del tiempo. Según hemos procedido, la inicialización ha sido sólo con sentido matemático en cada uno de ellos, ya que no se parte de un estado estacionario real, sino de uno ficticio. Esta situación es similar a la discutida en el Capítulo X al mencionar los simuladores por el método de relajación, que si bien se basan en resolver las ecuaciones diferenciales del modelo, el objetivo final consiste en la obtención de los estados estacionarios finales, ya que el simulador es utilizado con ese fin. Aquí vemos que en el estado estacionario obtenido (el tiempo tiende a infinito, las variables adoptan un valor constante) todos los caudales son iguales, lo cual es necesario como sabemos para que no exista acumulación.

La evolución de las presiones, sin embargo, muestra que las mismas se estabilizan a diferentes valores (ver Figura (XIV.10)), lo cual es comprensible, ya que en estado estacionario deben proveer la fuerza impulsora (gradientes de presiones) para la circulación del fluido. Si ahora estudiamos distintas perturbaciones desde el estado estacionario hallado,

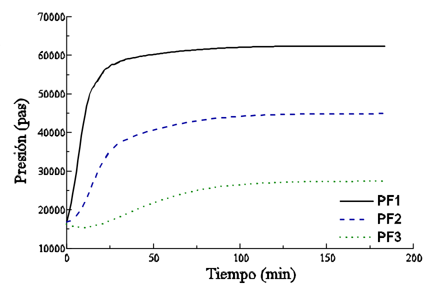


Figura XIV.10: Evolución de las presiones hasta el estado estacionario.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

podremos obtener conclusiones acerca de la evolución de las variables de interés.

En este ejemplo se estudiarán dos perturbaciones. Las mismas serán producidas a los 200 minutos y 400 minutos, contando el tiempo a partir de la condición inicial. La primer perturbación consiste en provocar un escalón en la presión de entrada P_e, desde su estado incial (P_e = 8. 10^4 kg/cm^2) a un valor menor (P_e = 5 kg/cm^2). La segunda perturbación a introducir (t = 400 min) consiste en provocar un salto escalón en el valor de la constante de la válvula C_{v3}, desde su valor inicial (10^{-3}) al valor cero, esto es, simular un bloqueo en la misma. El estado de partida es el estacionario obtenido a partir de la perturbación anterior, ya que los tiempos son elegidos de tal manera que cuando se realiza la 2da. Perturbación, se alcanzó el estacionario correspondiente a la primera.

En las gráficas siguientes se mostrarán las evoluciones correspondientes, una a continuación de la otra, según los valores de tiempo especificados para las perturbaciones. Notar que al tiempo que se produce la segunda perturbación, el sistema ya alcanzó el estado estacionario correspondiente a la primera.

Se hace notar que hasta aquí, al plantear los modelos, hemos supuesto que el flujo de líquido entre tanques se da desde izquierda a derecha, ya que suponemos que la presión del lazo izquierdo en todo instante es mayor que la del derecho. Esto no siempre será así, ya que el gradiente puede revertirse en función de alguna perturbación, y el modelo debe tenerlo en cuenta, como veremos seguidamente.

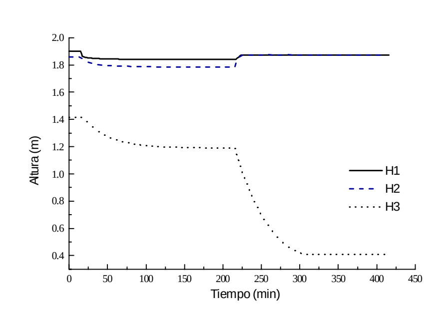


Figura XIV.11: Evolución de las alturas luego del escalón en la presión P_e.

A partir del instante de la perturbación, resolviendo el sistema de ecuaciones anterior, pero ahora con el nuevo valor para la constante modificada, se obtiene la evolución temporal de todas las variables del sistema. Por ejemplo, en la Figura (XIV.11) se muestra la evolución de las alturas de los respectivos recipientes. El primer tramo en la figura muestra el efecto de la reducción de la presión en la entrada, hasta llegar al nuevo valor estacionario. A partir de esta situación, y como consecuencia de suspenderse la alimentación del último tanque, en la segunda parte de la evolución se muestra cómo la altura del mismo tiende a reducirse a un mínimo valor (existe caudal de salida mientras que la presión del fondo del tanque sea mayor que P_4). Las alturas de los tanques anteriores (1 y 2), tienden a aumentar, ya que mientras el caudal sea positivo (la presión P_e sea superior a P_{f1}) ingresa líquido al sistema. No obstante, la presión del gas en el cuerpo de vapor se hará cada vez mayor, ya que mientras la altura sube, el volumen disponible se hace cada vez menor. Dado que hemos despreciado toda solubilidad del gas en el líquido, a cualquier presión no existirán cambios en los moles

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de gas existentes en la parte superior. Esto hace que en algún punto se igualen las presiones de entrada al tanque y la del fondo del mismo, anulando los caudales y, eventualmente, produciendo una reversión de flujo.

En la Figura (XIV.12) se observa (para la perturbación en C_{v3}, segundo tramo) una respuesta sinusoidal en el caudal S_1. Esto se debe a que la presión del gas en la parte superior del tanque actúa como amortiguador, provocando un flujo en uno y otro sentido, según el valor de las diferencias de presiones existente. La primera parte de la evolución en la Figura (XIV.12) muestra la respuesta de los caudales a la perturbación de la presión de entrada; los cuales llegan luego de un tiempo al nuevo valor estacionario (a partir del cual se introduce la segunda perturbación recientemente analizada).

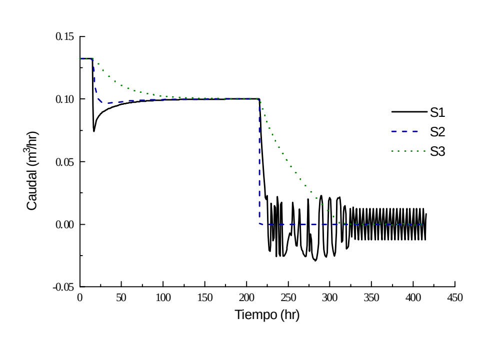


Figura XIV.12: Evolución de los caudales luego de la perturbación en la presión P_e.

Si bien no se muestra en la gráfica, la evolución de las presiones en el fondo de los tanques acompaña la trayectoria de la alturas de líquidos, ya que obviamente, éstas determinan la caída de presión que se tenga en cada instante de tiempo. Por ejemplo, la presión P_{f2} oscila (al igual que h_2) acompañando la evolución del caudal correspondiente en la Figura (XIV.12).

Como ya mencionamos, hasta ahora no hemos discutido el sentido de flujo, ya que siempre se supuso, al plantear las ecuaciones, que la presión de entrada era mayor que la del interior, lo que implicaba un flujo hacia el tanque. Pero esto no necesariamente será así en todos los casos durante la evolución del sistema, como en este ejemplo. Esto impone asegurarse en la expresión de la raíz en la Ecuaciones (35) a (37) que no sea negativa, para poder realizar el cálculo (lo cual se logra utilizando valor absoluto), pero por otro lado debemos *decidir* cual es el sentido del flujo, que dependerá del signo de la caída de presión.

Por otra parte, debemos tener mucho cuidado con el alcance que se dará a las simulaciones de un modelo propuesto, dado que las hipótesis abarcan un conjunto de hechos y conocimientos implícitos acerca del sistema, que son válidos en las condiciones planteadas, pero pueden cambiar si se perturba el sistema lo suficiente. Esto se da en la práctica cuando se tratan de simular fallas extremas (por ejemplo, situaciones donde un flujo se anula, etc.). Aquí las relaciones propuestas pueden no ser válidas, por ejemplo, debido a relaciones causales implícitamente asumidas en el modelo (sentido del flujo) que pueden revertirse o anularse bajo otras condiciones. Un ejemplo de relaciones causales es el siguiente: Al plantear la cantidad de calor que se disipa en un circuito eléctrico podemos escribir la conocida expresión $Q = I^2 R$. Si

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

bien en el modelo matemático la igualdad impone el doble sentido, esto es, el calor se iguala al producto de la derecha y viceversa, sabemos que en la realidad la circulación de corriente provoca la transformación cuantitativa en calor indicada (pérdidas) pero no se cumple la inversa debido a las limitaciones que impone el segundo principio de la termodinámica. *Esto determina un sentido de causalidad (orientación definida) a la interpretación de la ecuación dada, no disponible ni contenida implícitamente en el planteo de la ecuación escrita*. Es por ello que deberá tenerse cuidado en el contexto en el cual la utilizamos y la interpretación que hacemos de los resultados de un modelo que la contenga, si perturbamos diferentes variables que se encuentran vinculadas a partir de la misma.

XIV.3 MODELO PARA LA SIMULACIÓN DINÁMICA DE UN SEPARADOR FLASH

Este ejemplo ha sido ya discutido en el Capítulo IX, en el cual vimos que existen diferentes alternativas funcionales. A continuación plantearemos el caso correspondiente a la operación adiabática, manteniendo las hipótesis básicas realizadas en aquella oportunidad.

Hipótesis:

- El vapor y el líquido tienen el tiempo suficiente para lograr equilibrio de fases. Equilibrio instantáneo frente a la evolución temporal de las otras variables.
- Existe solo una fase líquida y otra vapor.
- No existen reacciones químicas.
- Sistema adiabático.
- Masa de vapor despreciable frente al líquido retenido en el equipo.

En general, al igual que en el caso de simulación en estado estacionario, para modelar este equipo recurrimos a los balances de materia y energía, pero ahora considerando el término de acumulación (ver Figura (IX.1)).

Balance de materia por componente (i = 1,.., NC):

$$\frac{dM_i}{dt} = F\ z_i - V\ y_i - L\ x_i \qquad (57)$$

Balance de energía:

$$\frac{d(HE)}{dt} = F\ HF - V\ HV - L\ HL \qquad (58)$$

donde los M_i representan el *holdup* de materia por componente en la fase líquida y HE

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la acumulación de contenido energético total, respectivamente. La simbología es la misma para la utilizada en el Capítulo IX.

Como en todo problema de simulación dinámica, se asume conocido el estado de las variables para el tiempo inicial. Este estado puede ser *real, o representativo de un estado estacionario*, con lo cual las trayectorias a calcular tienen sentido físico, o bien pueden ser *virtuales*. En efecto, como se ha explicado al analizar distintos tipos de simuladores estacionarios, en los basados en el método de relajación, el punto inicial puede que tenga (si no se parte de un estado estacionario) sólo sentido matemático (inicialización que no coincide con un estado estacionario real) y las trayectorias que se calculan no tienen significación física, ya que sólo el estado estacionario que se obtenga tendrá significado y es precisamente el resultado buscado, ya que estamos utilizando nuestro modelo como un simulador estacionario bajo una filosofía numérica que involucra la solución de ecuaciones diferenciales (método de relajación).

Para la simulación estacionaria de un equipo flash, esta filosofía no tiene ventajas respecto a la vista en el Capítulo IX, ya que no existen en general problemas serios de convergencia al resolver el sistema de ecuaciones algebraicas correspondientes. Por lo tanto, resolver el sistema de ecuaciones diferenciales involucra más tiempo de cómputo sin ventajas adicionales. Sin embargo, no se presenta la misma situación en la simulación de equipos para separación de mezclas multicomponente en arreglos múltiple etapa (Capítulo X). Allí vimos que en algunos casos es difícil obtener convergencia, aún con diferentes tipos de inicializaciones propuestas, en especial para mezclas fuertemente no ideales. En este caso, existen propuestas alternativas, según lo expuesto en la Sección (X.7), que reiteramos, se basan en resolver un sistema de ecuaciones diferenciales con el objeto de obtener el sistema estacionario deseado, a partir de una inicialización particularmente establecida o condición inicial a tiempo cero.

Volviendo a nuestro sistema de ecuaciones, vemos que tenemos $NC+1$ ecuaciones diferenciales. Conocido el estado al tiempo inicial, t_o, podemos evaluar el miembro derecho a partir de cuyo valor podrá nuevamente calcularse el nuevo estado (para $t = t_o + \Delta t$) de las variables diferenciales. Si todos los valores de las expresiones del miembro derecho son idénticamente nulos, es que estamos en un estado estacionario y para todo tiempo las variables diferenciales serán iguales.

En caso contrario, una vez obtenido el nuevo estado de las variables (M_i y HE), debemos calcular nuevamente el miembro derecho y así sucesivamente hasta llegar a valor fijado para el tiempo final de simulación especificado. Habitualmente se adoptan métodos de resolución explícitos para resolver el sistema de ecuaciones diferenciales (57), (58), dadas las características del sistema de ecuaciones a resolver.

Para resolver el miembro derecho debemos calcular los contenidos entálpicos (que son función de la temperatura, de la presión y de la composición de vapor y líquido). Además debemos conocer los valores de los caudales de líquido y vapor, suponiendo que conocemos el caudal de entrada, F, que *se supone constante*,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

al igual que el vector de composiciones, **z**, *la temperatura y la presión de la alimentación*.

Por definición, dados los valores *Mi*, sabemos que las fracciones molares se calculan según la siguiente expresión:

$$x_i = \frac{M_i}{\sum_{1=1}^{NC} M_i} \qquad (59)$$

Además, dado que suponemos un estado de equilibrio, se debe cumplir:

$$y_i = K_i \ (x, \ y, \ T, \ P) \ x_i \qquad (60)$$

Sin embargo, para realizar el cálculo, debemos conocer *T*, ya que *P* y las x_i son ahora conocidas.

Dado que es variable diferencial, conocemos en todo instante el contenido entálpico del líquido. Dado que suponemos despreciable el contenido entálpico y másico retenido de vapor (*holdup* de vapor despreciable), la única variable conocida corresponde a la fase líquida, cuya composición también lo es. Por lo tanto, a partir de la ecuación (HL se obtiene de dividir HE por el holdup másico):

$$HL = HL(x \ P, \ T) \qquad (61)$$

podemos calcular *T*, que es la única incógnita. Generalmente deberá recurrirse a un método iterativo.

Dado el valor de la temperatura, a partir de la Ecuación (60) podemos calcular ahora la composición de vapor. No obstante, para calcular el miembro derecho (Ecuaciones (57) y (58)), todavía debemos conocer los valores de los caudales molares del vapor y líquido (*V* y *L*, respectivamente).

Con las ecuaciones que hemos planteado, no podemos determinar dichos valores en función de las variables hasta ahora calculadas. Debemos encontrar nuevas relaciones, lo cual nos lleva a suponer un estado de operación particular, según hemos discutido profundamente en los ejemplos anteriores.

En general, las relaciones que necesitamos en este caso surgen de relacionar la caída de presión con el caudal. Para ello suponemos que las presiones a las cuales descarga nuestro sistema, o condición de contorno, esto es, en el límite de la cañería que transporta el caudal (*L* y *V* en este caso) son conocidas y constantes (asumimos control perfecto de las mismas). Obviamente, si consideramos un proceso completo, dado que para cada subsistema que compone el mismo se puede asumir la misma hipótesis, suponiendo que al final se descargan las corrientes producidas a la atmósfera o reservorios específicos (que en general pueden considerarse como

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

pulmones a condiciones constantes), esta hipótesis no es limitante, pero debe tenerse cuidado en la interpretación de los resultados al realizar una simulación, caso por caso. Por lo tanto, el caudal que nos preocupa puede ser calculado como el producto de un factor por la caída de presión. El factor será dependiente del tipo de arreglo utilizado (una simple cañería, flujo por gravedad, la curva característica de la bomba, una válvula de control, válvula manual, etc.). La caída de presión, como vimos, tiene una componente variable (la presión del equipo) y una constante conocida (la de descarga). Si el caudal de salida de la fase líquida fuera consecuencia de una restricción fija, es fácil obtenerlo mediante una simple relación en función de la altura líquida en el tanque de separación flash. La altura se puede calcular conociendo el área de la base del tanque (supuesta constante), dadas la masa líquida retenida y la densidad de la mezcla que se asume conocida y constante. Sin embargo, una instalación de este tipo no es muy atractiva tecnológicamente.

La regulación del caudal por medio de un controlador resultará en general más adecuada. Ello nos obliga a plantear cómo se relaciona el caudal de salida, *L*, en función del nivel y los parámetros del controlador de nivel. En efecto, un controlador que manipule el caudal de salida en función del error, ε, entre el nivel actual *h(t)* y el deseado o *set point*, h_{set}, nos brindará la relación buscada.

Un dato necesario en este punto es el tipo de controlador que utilizaremos. Dentro de los controladores típicos podemos mencionar al proporcional, el integral y el derivativo, como cualquiera de sus combinaciones; por ejemplo, el controlador PID (proporcional-integral-derivativo), según se analizará con mayor profundidad en el Capítulo XVI.

El más sencillo de los mismos, el proporcional, se basa en el simple principio de actuar mediante una señal enviada a la válvula de control (de tal manera que la misma actúe operando sobre el caudal) en una magnitud proporcional al error (diferencia entre el valor deseado *set point* y el actual o real). Esto es, la acción de control proporcional, *Acp*, resulta:

$$Acp = Kp\ \varepsilon \qquad (62)$$

donde $\varepsilon = (h(t) - h_{set})$ y *Kp* es la constante de acción proporcional del controlador (dato). A partir del valor de *Acp* y dado el tipo de válvula de control (lineal, igual porcentaje, etc.), se dispondrá de la ecuación que en función de *Acp* y la caída de presión entre el sistema y la descarga, nos brinde el caudal líquido de salida, *L*.

Si en cambio utilizamos un controlador derivativo, la acción de control resulta de la siguiente expresión:

$$A_{cd} = K_d \frac{d\varepsilon(t)}{dt} \qquad (63)$$

Esto es, la acción del controlador es proporcional a la derivada del error en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el instante *t*. En este caso, la derivada respecto del tiempo del error es equivalente a la derivada del nivel, que es dato. Sólo resulta necesario introducir la relación del caudal en función de la acción de control y de la válvula, con lo cual a partir de un reordenamiento algebraico es posible el cálculo del mismo sin inconvenientes.

Por último, si se utiliza un controlador integral o una combinación que contenga una parte integral, aparece la necesidad de incorporar una nueva ecuación diferencial. En efecto, la ecuación que liga la acción de control con el error en este caso responde a la forma:

$$Ac_I = K_I \int_o^t \varepsilon(t)\, dt \qquad (64)$$

Si derivamos ambos miembros respecto del tiempo se obtiene:

$$\frac{dAc_I}{dt} = \varepsilon(t) \qquad (65)$$

De esta forma, a partir del error instantáneo, puede calcularse la acción integral del controlador en cada instante de tiempo posterior, con la cual a su vez se puede evaluar el caudal correspondiente a través de las relaciones apropiadas. Obviamente, cualquier combinación (por ejemplo un controlador proporcional integral derivativo PID) puede modelarse combinando las ecuaciones anteriores. Sin embargo, debe adicionarse una nueva ecuación diferencial al sistema representativo del evaporador flash.

Lo importante, entonces, es haber logrado relacionar mediante un sistema de ecuaciones, las variables diferenciales con las corrientes de salida que necesitamos calcular, ya que de lo contrario no podríamos plantear la dinámica del sistema. En este punto resulta importante remarcar, que al agregar un lazo de control, las respuestas obtenidas al resolver el modelo son a lazo cerrado, mientras que si modelamos el equipo sin incluir lazos de control, las respuestas obtenidas son a lazo abierto. No necesariamente, en todos los casos, necesitamos recurrir al expediente de introducir controladores para relacionar las variables de interés; dependiendo esto de la situación real que se quiera modelar.

Resumiendo, independientemente del número de ecuaciones diferenciales que deban agregarse por la especificación de ciertos controladores, es posible disponer de expresiones que brindan las corrientes de salida del equipo. En efecto, sea por ejemplo el sistema indicado en la Figura (XIV.13), donde P_v es la presión de vapor en el cuerpo de vapor, h es la altura, P_{set} y h_{set} los valores deseados o *set points*, P_1 y P_2 las presiones de descarga (conocidas y constantes). Aquí se agregan, a las ecuaciones ya planteadas, aquellas que permitan vincular el caudal de vapor y líquido con las variables diferenciales. Las mismas tienen el siguiente formato general:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$V = f(P_v - P_{set}), P_1, \text{tipo de válvula, algoritmo de control}) \qquad (66)$$

$$L = f(h - h_{set}), P_2, \text{tipo de válvula, algoritmo de control}) \qquad (67)$$

Hasta aquí no hemos especificado nada acerca de la corriente de salida vapor. Dado que asumimos *holdup* de vapor constante, no tenemos ninguna ecuación diferencial que nos brinde la evolución de la masa retenida de vapor.

Podemos proceder, como ya vimos en el capítulo anterior, según dos opciones. En una se puede asumir que la masa de vapor es despreciable frente a la de líquido, por lo tanto P_v puede calcularse como la presión de equilibrio (presión de vapor de la mezcla P_{vs}). En efecto, dado que tenemos una mezcla multicomponente y por lo tanto cada componente ejerce una presión parcial en la fase vapor, debemos determinar ahora la presión de vapor de la mezcla. Si en cambio suponemos que la masa de vapor varía con el tiempo, deben plantearse las ecuaciones diferenciales correspondientes. Para ello asumimos una función de transferencia para calcular la masa evaporada. Además, o bien debemos calcular la variación de la temperatura para el gas o asumimos equilibrio térmico, según se ha indicado en los ejemplos anteriores.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

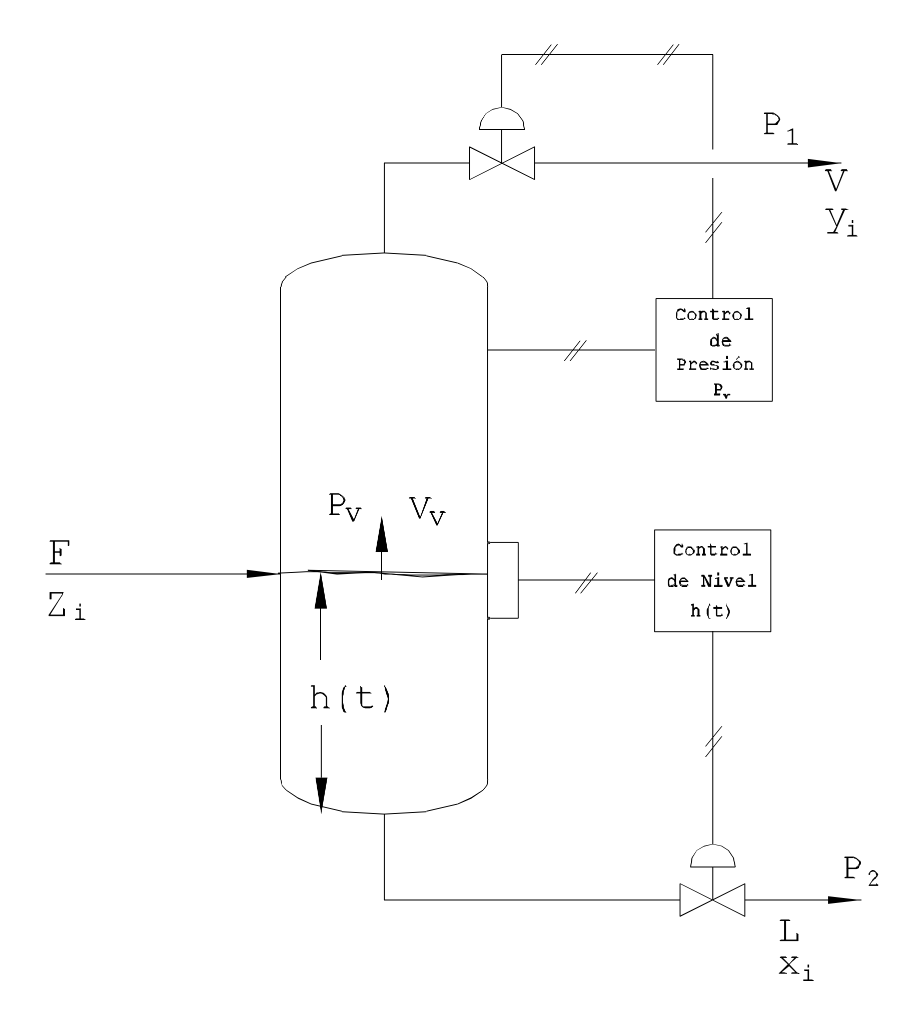


Figura XIV.13: Equipo de evaporación flash. Mezcla multicomponente. Caudal de líquido de salida y presión controladas.

En este caso, la ecuación que nos brinda la masa evaporada puede ahora plantearse:

$$V_v = K\ (P_{vs} - P_v) \qquad (68)$$

donde P_{vs} es la presión de vapor de la mezcla, K es una pseudo-constante de transferencia de materia en la interfase líquido-vapor y P_v es la presión de vapor en el volumen disponible para el mismo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Como ya mencionamos, mientras más elevado sea el valor asignado a K, más próximo al equilibrio ($P_v \rightarrow P_{vs}$) se comportará el sistema. Se puede observar qué sucede cuando se emplean distintos valores de K, con lo cual se supone un grado de no-equilibrio en la transferencia de materia entre ambas fases. Para plantear el modelo, en este caso, se debe agregar al sistema de ecuaciones las correspondientes a la fase vapor. Esto es:

$$\frac{dM_i}{dt} = F\ z_i - L\ x_i - V\ y_i$$

$$\frac{d}{dt}(HE) = F\ HF - V\ HV - L\ HL$$

$$\frac{dM_G}{dt} = V_v - V \qquad (69)$$

La ecuación que nos brinda la masa evaporada es la (68).

Por otra parte, al igual que los ejemplos anteriores, puede calcularse P_v según:

$$P_v = \frac{n\ R\ T_G}{V_G} \qquad (70)$$

donde V_G es el volumen disponible para el vapor (volumen del tanque menos el ocupado por el líquido), T_G es la temperatura del gas, igual a la del líquido si se asume equilibrio térmico, y n se obtiene a partir del *holdup* de vapor, M_G, y el peso molecular promedio de la mezcla. Por último, debemos utilizar en la Ecuación (66) el valor de la presión calculado según la Ecuación (70) y no la de saturación o equilibrio.

Finalmente, para este equipo, pueden plantearse diversas alternativas, similares a las analizadas en el Capítulo IX para el caso estacionario. Por ejemplo, la operación en estado isotérmico (suponiendo control perfecto de temperatura y calculando en el tiempo la evolución del calor intercambio al igual que las otras variables de interés), proponiendo además diversos arreglos de controladores, etc. Algunas de estas alternativas son planteadas como ejercicios en la sección de problemas propuestos.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Confeccione un diagrama de flujo para implementar un programa que calcule la variación de la altura de un tanque según el modelo planteado en el Ejemplo (1). Nota:

Suponga que dispone de subrutinas de cálculo para resolver ecuaciones diferenciales, tales como las desarrolladas en los problemas propuestos en el Capítulo XIII.

P2) Plantee un simulador dinámico para el reactor ejemplificado en la Figura (P2), en el cual se produce la siguiente reacción química $A + 2B \rightarrow 3C + 2D$, donde *A* y *B* son componentes que ingresan según lo planteado en el esquema. Suponga que el calor de reacción es despreciable. Asuma un conjunto de hipótesis similar a los ejemplos desarrollados en el capítulo.

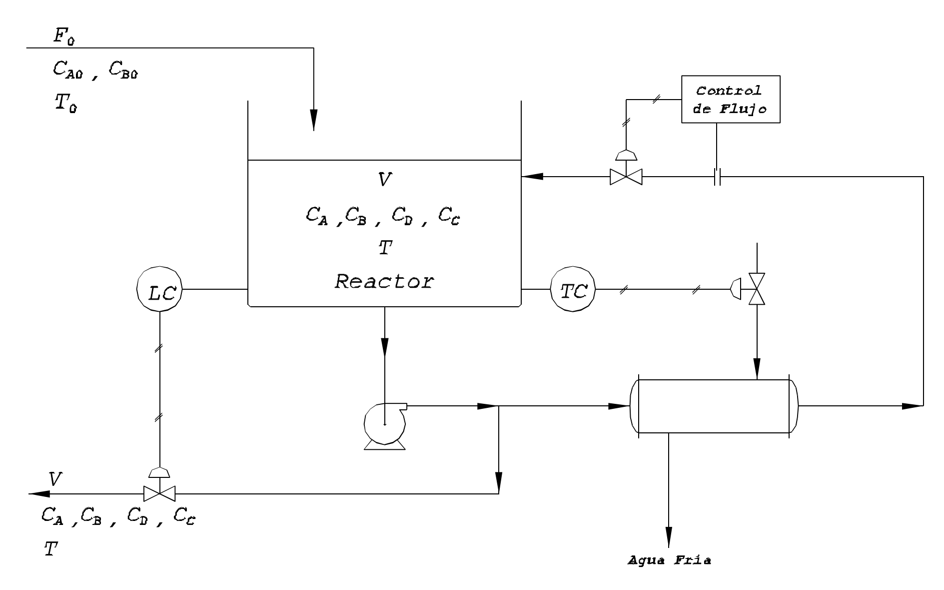


Figura XIV.P2

P3) Confeccione un programa para el cálculo de la variación de altura de cada recipiente indicado en la Figura (XIV.8b). Asuma que dispone de las subrutinas matemáticas correspondientes.

P4) Plantee un modelo para un evaporador flash isotérmico. Suponga que dispone de controladores de nivel cuya variable manipulada es el caudal de líquido de salida y un controlador de presión que manipula el caudal de vapor.

P5) Suponga que el área del tanque del Ejemplo (1) varía según una cierta ley *f(h)*, esto es, una función explícita de la altura. Plantee las ecuaciones diferenciales para resuelva este nuevo caso, según las hipótesis restantes del mismo ejemplo.

P6) Suponga que el tanque del Ejemplo (2) ahora se *pincha* debido a corrosión, por lo que se produce un agujero de area *Ag* y a una distancia *Hs* de la base. ¿Cambia el modelo del equipo?.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

P7) Para un el caudal de un flujo que rebosa puede aplicarse la siguiente fórmula $Q = k\ H_r^{2/3}$, siendo k una constante y H_r la altura de líquido sobre el rebosadero (que no puede asumirla constante e igual al valor de diseño para el rebosadero *hr*). Suponga que la descarga del tanque (ver Figura (P8)) es bajo esta forma. Escriba el conjunto de ecuaciones diferenciales que gobierna el sistema. Proponga un procedimiento numérico para hallar el tiempo en el que se alcanza el estado estacionario dado un punto inicial.

P8) Sea un tanque similar al analizado en el Problema (P7) en el cual se produce una reacción química según se describe en la Figura (P8). Suponer calor de reacción despreciable y densidad constante. Reacción $2A + 3\ B \rightarrow C$. Obtener el modelo dinámico correspondiente y determinar la variación de la composición de *A*, *B*, y *C* con el tiempo. Se conocen todos los valores indicados en la entrada del tanque y las características del mismo. Despreciar para el cálculo de la conversión de reactivos en productos el volumen de líquido por encima de la altura *H*.

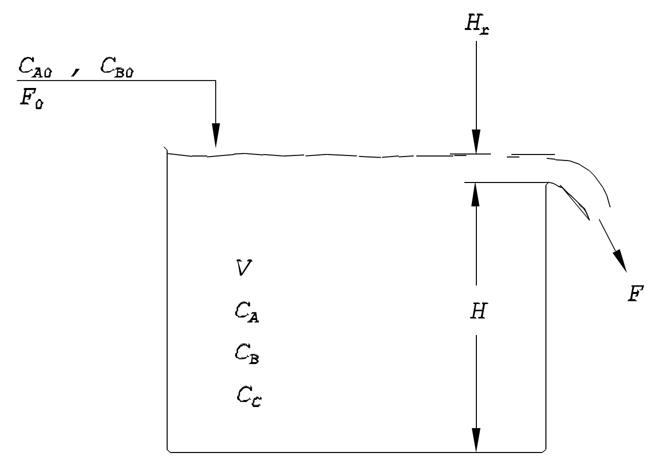


Figura XIV.P8

P9) ¿Cómo se modifica el planteo del modelo de un equipo flash si existe en la fase líquida una reacción química?. Qué datos necesita en esta nueva situación?. Cuáles hipótesis deben revisarse con respecto a las asumidas en nuestros ejemplos?.

P10) Modifique el diagrama de flujo de cálculo propuesto para los Ejemplos (6) y (7) si se utilizara un método explícito predictor-corrector para la integración numérica del sistema de ecuaciones correspondientes. ¿Cambia en algo este hecho el procedimiento o estrategia de resolución?.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA O RECOMENDADA

- Franks, R. G. E., *Mathematical Modeling in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. NY (1965).
- Franks, R. G. E., *Modeling and Simulation in Chemical Engineering*, John Wiley and Sons Inc. NY (1972).
- Luyben, W. L., *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineering*, 2nd. edition, McGraw-Hill Chemical Engineering Series (1990).
- Holland, C. D., *Fundamentals of Multi-Component Distillation*, Mc Graw-Hill, N.Y. (1981).
- Holland, C. D. y A. I. Liapis, *Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems*, pág.. 188, McGraw-Hill, N.Y. (1983).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XV

SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS DE SEPARACIÓN MÚLTIPLE ETAPA EN CONTRACORRIENTE

Por
Nicolás J. Scenna

XV.1 INTRODUCCION

En el capítulo anterior analizamos diversas operaciones sencillas, introduciendo los métodos propios habituales para el modelado dinámico de procesos. Se estudiaron además, sistemas de complejidad creciente. En este capítulo trataremos, al igual que en el Capítulo X, equipos de separación de mezclas multicomponentes, en un arreglo múltiple etapa en contracorriente.

Se analizará con detalle el caso de simulación rigurosa, para luego simplificar el modelo correspondiente, contemplando casos más simples. Se enfatizarán aspectos conceptuales y generales, evitando incorporar ecuaciones específicas (por ejemplo controladores, bombeo de fluidos, caídas de presión para casos particulares, etc). Esto es debido a que una cascada de etapas (como vimos en el Capítulo X), presenta un número muy grande de ecuaciones, por lo que se considera conveniente minimizar factores complementarios al modelo “principal”. En capítulos posteriores se enfatizarán los aspectos para el modelado de distintos tipos de controladores y sistemas de bombeo de fluidos, incorporando sus ecuaciones al sistema correspondiente.

Si bien un arreglo de las características como el analizado en el presente capítulo representa tecnológicamente varias alternativas, como ser extracción líquido-líquido, absorción, destilación, etc., es esta última la más conocida y utilizada. La destilación es, en la actualidad, una tecnología relativamente madura (encontrándose en el punto de saturación en la curva sigmoidea -Figura I.1-), dado que los comienzos de su práctica industrial intensiva se remonta a fines del siglo pasado. Al presente, se ha constituido en la técnica más usada mundialmente para separaciones de gran escala, a pesar de ser una operación unitaria muy ineficiente y consumidora de energía. En las últimas décadas se ha renovado el interés en la investigación de métodos eficientes energéticamente en la práctica de la destilación, debido a los dramáticos aumentos en el costo de la energía producidos en el pasado, y por la necesidad de reducir costos de operación en las industrias que producen commodities,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ya que el margen de ganancia se reduce día a día. Dichas investigaciones están encaminadas a unidades cada vez más grandes y complejas (superfraccionadores, trenes de columnas, integración energética, etc.) debido a su economía de escala, por lo que resulta necesario un control más sofisticado y estricto para lograr separaciones precisas y adecuadas. Dentro de este contexto, cuando se piensa en un modelo estacionario o dinámico, para que sea lo suficientemente general y riguroso debiera tenerse en cuenta:

- Configuraciones de destilación no convencionales,
- Hidráulica de platos rigurosa,
- Aptitud para simular transitorios altamente discontinuos como el arranque y parada,
- Destilación discontinua (batch), y
- Destilación reactiva.

Esta última operación, la destilación conjunta con la reacción química es una operación especialmente conveniente para aquellas reacciones donde el equilibrio químico limita la conversión en un reactor convencional, a un nivel bajo o moderado. Separando continuamente los productos de los reactivos mientras progresa la reacción, la misma puede llegar a un nivel alto de conversión, mucho mayor que del otro modo (principio de Le´ Chatellier).

Por ejemplo, la producción de ésteres combustibles oxigenados aditivantes de las motogasolinas (como el MTBE = metil terbutil éter y el TAME = teramil metil éter) es un proceso donde la destilación reactiva es particularmente aplicada.

El beneficio más importante de la destilación reactiva es la reducción del capital invertido. Por llevarse a cabo la reacción y la destilación en el mismo equipo, una operación en el proceso es eliminada junto con las bombas, instrumentos y cañerías con ella asociados. Otros beneficios dependen específicamente de la reacción química.

Esta operación es potencialmente atractiva cuando una reacción en fase líquida debe ser llevada a cabo con gran exceso de un reactivo, alto calor de reacción y significativa velocidad a la temperatura de destilación. Bajo tales circunstancias, los procesos convencionales incurren en grandes costos de reciclo para el reactivo en exceso. Sin embargo, la destilación reactiva puede efectuarse en condiciones mucho más favorables desde el punto de vista estequiométrico. En efecto, cada reacción química procede hasta llegar al equilibrio. La composición química en el equilibrio es tal que la energía libre de Gibbs es mínima para una temperatura dada. Hay reacciones químicas catalizadas por sólidos en las cuales, a temperatura razonable, la mezcla líquida contiene una importante concentración del reactivo todavía no convertido. Aún cuando una alta concentración de uno o más reactivos esté presente, la reacción puede no proceder a consumir completamente el reactivo estequiométricamente limitante. Tales reacciones son generalmente descritas como

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

reacciones limitadas por el equilibrio. Para éstas, como expresáramos más arriba, la conversión del reactivo limitante puede ser sustancialmente incrementada extrayendo los productos formados de la mezcla reactiva.

Algunas reacciones químicas tienen significativo calor de reacción (ΔH_r), pudiendo ser exotérmicas o endotérmicas. En un reactor adiabático esto provoca un marcado cambio en la temperatura de la mezcla a medida que la reacción progresa. Este gran cambio de temperatura podría modificar desfavorablemente el equilibrio químico de la reacción, bajando la conversión y reduciendo potencialmente la selectividad. Esto también puede ir en detrimento de la estabilidad del catalizador. Para tales reacciones químicas, en los procesos convencionales, un buen diseño puede implicar dividir el reactor en distintas etapas con refrigeración entre las mismas para las reacciones exotérmicas o calentamiento entre etapas para las endotérmicas. Una alternativa puede ser incorporar áreas de transferencia de calor dentro del reactor. En cualquiera de los casos anteriores el costo del equipo se incrementa.

En una columna de destilación reactiva, el calor de reacción no afecta la temperatura de la mezcla y por esta razón no se modificará el equilibrio de la reacción. En cualquier punto cercano al catalizador, el calor de reacción causa una adicional transferencia de masa (vaporización o condensación) entre la fase vapor y la fase líquida. La temperatura de la fase donde ocurre la reacción será el punto de burbuja para su composición; que será uniforme y constante a lo largo de la sección de la columna. Por lo tanto, se obvia el equipo de transferencia de calor. En el caso de una reacción exotérmica, el calor de reacción es utilizado directamente para la destilación. Sin embargo, debido al amplio rango de temperaturas y presiones en las cuales operan los reactores químicos, sólo algunas reacciones hasta ahora han podido llevarse a cabo industrialmente bajo esta alternativa, que requiere rangos de operación en temperatura y presiones acotadas, las que generalmente son utilizadas en destilación.

Debe mencionarse que esta operación es conocida desde principios de siglo. En efecto, Backhaus obtuvo la primera de una serie de patentes en el año 1920 describiendo la operación de la destilación reactiva para la producción de ésteres. (Leyes y Othmer, 1945) propusieron un procedimiento para calcular columnas reactivas en estado estacionario. Como ejemplo analizaron el proceso de obtención del acetato de butilo. (Berman y col., 1948) estudiaron la producción continua del ftalato de dibutilo, utilizando ácido sulfúrico como catalizador homogéneo, en una columna de destilación en modo continuo. Luego de un período de maduración académica y pruebas a escala piloto, existen en la actualidad numerosas patentes de procesos exitosos utilizando este principio; tales como el proceso inventado por Agreda y col. (1990), -U.S. patente (4.939.294, 1990), y (4.435.595, 1984)-, el proceso para la obtención del Nylon 6,6 (Grosser y col., 1987), (Jaswal y col., 1975), -patente U.S (3.900.450, 1975)-; el proceso para la obtención de MTBE (Smith, patente U.S. 4.307.254, 1981) y (Nocca y col., 1989), entre otros.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En la actualidad se investigan numerosos procesos. En efecto, isomerizaciones, dimerizaciones, esterificaciones, cloraciones, hidrataciones, dehidrohalogenaciones, alquilaciones, polimerizaciones, metalaciones, trans-esterificaciones, etc, son continuamente analizados para nuevas aplicaciones industriales.

Existen al menos dos hipótesis al encarar el diseño de torres reactivas. El primero supone que la reacción se lleve a cabo instantáneamente llegando al equilibrio (Espinosa y col., 1995), (Barbosa y Doherty, 1988). En el segundo caso, se supone que están dominadas por la cinética, es decir que, ya sean irreversibles o reversibles, necesitan un tiempo de residencia que no resulta despreciable, para llegar al punto de equilibrio.

Existen numerosos algoritmos de cálculo propuestos, asumiendo la hipótesis de equilibrio instantáneo. Sin embargo, no resultan aplicables cuando el tiempo de residencia es limitante. Por otra parte, muchas reacciones son catalizadas en fase sólida, por lo cual la reacción es heterogénea. Aquí son muy importantes (si se pretende un modelo riguroso), los modelos que contemplan la velocidad de transferencia de masa entre fases, y la presencia del relleno en la columna. Si bien existe numerosa bibliografía sobre el tema, se remite al lector interesado a las interesantes revisiones de (Davied, 1971), (Dilfanian, 1978), (Terril y col., 1985) y (Doherty, 1992), entre otros. También se reportan modelos para el cálculo de torres reactivas heterogéneas (Sawitowsky y Pilovakis, 1979, 1988), y más recientemente (Yuiang y Xien, 1992).

Para el caso en que la reacción necesite para desarrollarse un cierto tiempo de residencia, es importante calcular el líquido retenido en cada plato. Para ello es necesario disponer de un modelo que contemple la hidráulica de platos (gradientes de presiones, holdups líquidos, etc). De lo contrario, sólo las reacciones instantáneas pueden ser analizadas rigurosamente. En efecto, si se necesita un gran tiempo de residencia para que se desarrolle la reacción, todas las variables hidráulicas deben ser analizadas, ya que de lo contrario no podemos evaluar la retención de líquido con exactitud. Consecuentemente, los modelos dinámicos simplificados son decididamente inadecuados, o sólo aproximados, en el mejor de los casos.

Para plantear un modelo general, al igual que en el módulo flash del capítulo anterior, debemos considerar las ecuaciones diferenciales que surgen del balance de materia y energía. Aquí el problema radica, al igual que en el caso estacionario (ver Capítulo X) en la gran cantidad de ecuaciones resultantes cuando el equipo posee numerosas etapas y componentes, agravándose con la presencia de mezclas de comportamiento altamente no ideal al igual que las no linealidades que introducen las reacciones químicas.

XV.2 MODELO PARA SISTEMAS DE SEPARACIÓN MÚLTIPLE-ETAPA MULTICOMPONENTE EN CONTRACORRIENTE.

Debido a la complejidad inherente a la solución del sistema de ecuaciones

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

diferenciales de alta dimensión y fuertemente no lineales, históricamente (al igual que para el caso estacionario) se han propuesto varios métodos o algoritmos para las simulación dinámica de columnas de destilación, ya sean convencionales o reactivas.

A continuación se expondrá sintéticamente, y por orden de complejidad, los distintos tipos de modelos propuestos.

En efecto, muchos modelos dinámicos de destilación han sido publicados en la literatura especializada, presentando varios de ellos numerosas simplificaciones. Muchos asumen hipótesis que reducen la dimensión y la dificultad del problema numérico; lo cual trae aparejado predicciones alejadas de la realidad en procesos altamente discontinuos como el arranque, parada y destilación batch.

Según (Doherty y Perkins, 1982) los modelos en general desarrollados (basados en la hipótesis de etapas de equilibrio -ver X.1-) pueden clasificarse dentro de algunos de los siguientes tipos:

- *Modelos C:* Sólo tienen en cuenta los cambios en la composición con el tiempo. La retención de líquido sobre los platos y el contenido entálpico, y por lo tanto los caudales internos de líquido y vapor, cambian en el tiempo en forma dependiente.
- *Modelos CH*: Sólo tienen en cuenta los cambios en la composición y retención de líquido (hold-up) en los platos mediante ecuaciones diferenciales que los describen. Los cambios entálpicos se consideran instantáneos.
- *Modelos CE:* Ídem al anterior pero con respecto a la composición y entalpía de cada plato.
- *Modelos CHE:* Se tienen en cuenta los cambios en la composición, retención (holdup) y entalpía. La dinámica es descripta por medio de ecuaciones diferenciales que representan los balances de entalpía y materia (por cada componente), juntamente con ecuaciones o correlaciones termodinámicas e hidráulicas suplementarias. Son los más rigurosos.

Seguidamente se expondrá sintéticamente el sistema de ecuaciones que resulta de plantear un modelo que pertenece a la familia de modelos rigurosos (CHE), esto es, incluyendo hidráulica de platos, y por lo tanto la variación de presión en función del tiempo en cada etapa. A diferencia del Capítulo X, aquí consideramos además, la presencia de reacciones químicas en la fase líquida. Sin embargo, al igual que en los casos anteriores, no contemplamos el holdup de la fase gaseosa, asumiéndolo despreciable, y con una composición en equilibrio con la fase líquida (o afectada según la eficiencia de Murphree). Por otra parte, al considerar la hidráulica, es posible fácilmente incorporar ecuaciones para el cálculo de arrastre tanto de líquido como de vapor al igual que la posibilidad de verificar inundación de platos (Gani y col., 1985) y (Ruiz, 1986).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Aquí se plantearán (para mayor sencillez conceptual) los balances correspondientes sin considerar los términos de arrastre, ya sea de líquido o vapor. Por otra parte, al contemplar condiciones hidráulicas de operación, debemos ahora disponer de datos precisos acerca de parámetros de diseño del equipo, que generalmente no son necesarios cuando se pretende realizar el cálculo de los balances de energía y materia solamente. Por ejemplo, las ecuaciones para el cálculo de la caída de presión a través de platos de distintos tipos son diferentes. Aquí debemos plantearnos además, la posibilidad de utilizar torres rellenas, considerando nuevamente distintos tipos de los mismos (desordenado, ordenado, etc.). En definitiva, a medida que contemplamos nuevos factores, debemos contar con más datos, y cada vez más específicos respecto del sistema a simular. Por supuesto, los resultados obtenidos serán cada vez más representativos de la operación real del equipo.

Como vimos, los modelos CHE consideran la presión variable en el tiempo así como plato a plato. El modelo consiste en un grupo de ecuaciones diferenciales ordinarias que representan los balances de materia y energía en cada plato de la columna bajo estudio y en el condensador y el rehervidor. Además, como este modelo es dinámico, dentro de estas ecuaciones pueden incluirse los efectos de los controladores, más específicamente la integral del error, si se trata de un controlador PI o PID. En un modo muy general, las ecuaciones que representan el sistema pueden escribirse de la siguiente forma:

$$dy/dt = f\ (y(t),\ p(t),\ t)$$

$$p(t) = g\ (y(t),\ z,\ t)$$

donde *y(t)* es el vector de las variables diferenciales, es decir la masa retenida de cada componente y en cada plato, y el contenido energético de cada etapa. Mientras tanto, *p(t)* es el vector de las variables de proceso (caudales de líquido y vapor, composiciones de plato, entalpías en cada fase, y los datos de las alimentaciones en cada plato de la columna). Por último, *z* es el vector de las variables de diseño e incluye detalles de la geometría de la columna, detalles del control, etc. La variable independiente es el tiempo, *t*.

Dados los valores iniciales del vector $y(t_0)$, en un tiempo inicial dado t_0, se deben obtener los valores de la función (miembro derecho), es decir *f(y,p,t)*. Con este valor se "activa" al integrador numérico, que obtiene los valores del vector *y (t)* para un tiempo $t' = t + h$, donde *h* es el incremento de la variable independiente. El valor de *h* debe ser elegido cuidadosamente, para evitar problemas de stiffnes, y minimizar el error de estimación. Este valor puede variar paso a paso, como hemos visto en el Capítulo XIII.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En un planteo más riguroso, puede también adicionarse el cálculo de la dinámica del tambor de reflujo y/o del rehervidor. Por otra parte puede incorporarse el cálculo de las pérdidas de calor a través de las paredes (simulación no adiabática de la columna), el estudio del efecto de la aireación, el factor de espumado, la formación de olas e hidráulica del desaguadero, etc.

El modelo para la simulación dinámica debe contemplar entonces, entre otros aspectos, el modelado del equilibrio entre las fases, el modelo del comportamiento hidráulico de los platos, la integración numérica del sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias resultante, etc. Como hemos visto, el primer paso para obtener el modelo será siempre el planteo de las ecuaciones de balance, las cuales, en función de las hipótesis adoptadas, nos brindarán el sistema de ecuaciones tanto diferenciales como algebraicas que tendremos luego que resolver numéricamente.

Antes de plantear el sistema de ecuaciones y las hipótesis relacionadas, debemos profundizar un punto mencionado anteriormente. Dado que a continuación discutiremos modelos tipo CHE, en los cuales se considera en parte la hidráulica, debemos necesariamente realizar una distinción básica. En efecto, es sabido que tecnológicamente una operación de destilación de una mezcla multicomponente puede realizarse en una columna de destilación que contenga platos de diversas características. Las ecuaciones hidráulicas que se asocian a un plato de válvulas no serán lógicamente las mismas que para un plato de calotas o perforado. Además, la asociación implícita que realizamos en el Capítulo X al modelar una columna de destilación consistió en que cada etapa teórica (las que denominamos genéricamente etapas i = 1,...., N) se vinculaba con el plato real a través de la eficiencia de Murphree (constante). No consideramos ninguna otra variable, como las que aquí estamos discutiendo; por ejemplo los elementos geométricos del plato y sus distintos tipos, que en principio podrían ser utilizados para estimar la eficiencia del mismo.

Por otro lado, conocemos que tecnológicamente podemos implementar la misma operación unitaria por medio de columnas de relleno. Es más, también en esta variante se dispone de distinto tipo de relleno, como ser desordenados, ordenados, etc. En este caso, lógicamente las correlaciones hidráulicas serán totalmente diferentes a las requeridas para el cálculo en platos. Esto nos lleva a plantearnos cuál es la vinculación entre etapa teórica o ideal (como planteamos nuestro modelo hasta ahora) y la materialización de cada etapa real con rellenos. Para esto, debemos recordar el concepto de altura equivalente de la etapa teórica, el cual nos brinda la altura de relleno necesaria para cumplir la función de cada etapa teórica o ideal, según discutimos brevemente en la Sección X.1.

Dado que a continuación trataremos aspectos de simulación dinámica, resulta evidente que los problemas expuestos en la Sección X.1 se magnifican. En efecto, la eficiencia o la HEPT (altura equivalente de plato teórico) variará con el tiempo, debido a la evolución de las variables intensivas con el mismo. Al igual que lo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

comentado en X.1, en un futuro muy cercano, muy probablemente se generalizarán los modelos basados en velocidades de transferencia (denominada en inglés *rate based*) también para el modelado dinámico. Esto permitirá resolver las inconsistencias producidas cuando queremos aplicar los resultados obtenidos utilizando modelos basados en etapas, a equipos de contacto continuos, o bien considerar los efectos de la no-idealidad en la transferencia de materia o energía en el sistema, en forma más natural.

A continuación, al igual que lo realizado en el Capítulo X, se analizarán modelos basados en etapas de equilibrio, por ser los más comunes y utilizados al presente, o sea que seguiremos considerando al sistema compuesto por etapas teóricas, lo cual implica que su uso natural estará más vinculado con equipos de destilación o equivalentes, que contengan bandejas de separación (platos).

XV.2.1 Sistema de Ecuaciones del Modelo

Las hipótesis adoptadas para el modelo, que son básicamente las que se introdujeron en el Capítulo X para el sistema estacionario, se enumeran a continuación:

- Se conoce el calor adicionado/extraído en cada etapa.
- Se conocen las expresiones cinéticas y los parámetros de reacción química.
- La masa de vapor en el plato es insignificante, comparada a la masa del líquido.
- El vapor y el líquido que salen del plato están en equilibrio térmico.
- Se supone mezcla perfecta de líquido y vapor, aplicándose la definición de la eficiencia de Murphree en cada plato, independientemente de la presencia de reacciones químicas en la fase líquida.
- Se considera columna adiabática, se desprecia el calor intercambiado con el medio ambiente, al igual que el intercambiado entre las corrientes y la estructura metálica de la torre.
- Todas las reacciones químicas ocurren en la fase líquida. Se conocen todas las etapas en las cuales se producen las reacciones.

La hipótesis de holdup de gas despreciable es bastante razonable, debido a la baja densidad del vapor con respecto a la del líquido, mientras que la suposición de mezcla perfecta y eficiencia de Murphree (constante) en el plato se necesitan para reducir la complejidad del problema, ya que de otra manera sería necesario resolver ecuaciones diferenciales a derivadas parciales en cada plato. La precisión que se obtendría de esta manera no justificaría el incremento en la dimensión y tiempo de cálculo necesarios, salvo casos específicos. Por otra parte, no se reportan en la bibliografía modelos de estimación de eficiencias en presencia de reacciones químicas. Además, aún sin reacciones químicas, su cálculo resulta complicado y poco confiable, en particular cuando se involucran mezclas de comportamiento altamente

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

no ideal, es decir que el procedimiento de cálculo es difícilmente generalizable.

Desde el punto de vista de la reacción química, esta suposición es válida para diámetros de platos pequeños, pero es relativamente problemática para diámetros muy grandes. Aún cuando existen numerosos modelos para la evaluación del efecto del mezclado en los platos para el cálculo de columnas de destilación, (modelos de celdas, de difusión, etc.), su planteo introduce un número importante de nuevas ecuaciones, complicando de manera significativa la resolución del modelo, de la misma manera que lo expresado más arriba para el efecto del mezclado en los platos.

Para calcular la producción o consumo de componentes debido a las reacciones químicas, deberá definirse el/los platos donde ocurre la(s) reacción(es), orden de reacción, coeficientes estequiométricos y constantes de velocidad (evaluadas por ejemplo según la ecuación de Arrhenius). El término de reacción (moles reaccionados o producidos por unidad de tiempo y volumen del componente j en el plato i) se calcula a través de expresiones cinéticas. Aquí suponemos aplicable la ley de acción de masas.

Como hemos repetido en varias oportunidades, para obtener las respectivas ecuaciones recurrimos al planteo de los balances de materia y energía, y toda otra relación que corresponda, vinculando las variables que representan nuestro sistema. Se utilizan los mismos símbolos básicos planteados en el modelado de torres en estado estacionario (Capítulo X). Aquí, para simplificar, se obvian los caudales de extracción en cada etapa, aún cuando no introducen grandes complicaciones en el modelo ya que por lo general se los asume constantes, o sea, perfectamente controlados.

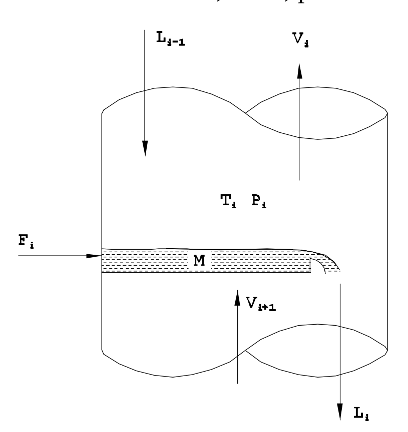


Figura XV.1

Balance de materia para el plato i, componente j

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dM_{i,j}}{dt} = F\ z_{i,j} + V_{i+1} y_{i+1,j} + L_{i-1} x_{i-1,j} - V_i\ y_{i,j} - L_i\ x_{i,j} + RE_{i,j} \qquad (1)$$

con $i = 1....\ N, j=1...NC$ y RE_{ij} representando los moles producidos del componente *j* por reacción química.

Balance total de energía para el plato i. (El calor de reacción ΔH_{ri} es dado por el usuario o evaluado a través de los calores de formación de compuestos puros):

$$\frac{d(HE_i)}{dt} = F_i HF_i + V_{i+1} HV_{i+1} + L_{i-1} HL_{i-1} - L_i\ HL_i - V_i\ HV_i + \Delta H_{r,i} + Q_i \qquad (2)$$

con Q_i calor intercambiado con el medio ambiente (se lo supone dato y constante en el tiempo) y HE_i contenido o holdup energético del plato *i*.

Balance de materia total para el plato i.

$$\frac{dM_i}{dt} = F_i + V_{i-1} + L_{i-1} - V_i - L_i \qquad (3)$$

El holdup total (Mt) de materia en el plato *i*, y el holdup total de energía son definidos según:

$$Mt_i = \sum_{j=1}^{NC} M_{ij} \qquad (4)$$

$$HE_i = Mt_i\ HL_i \qquad (5)$$

Por definición, la suma de las fracciones molares deben ser la unidad, luego:

$$\sum_{j=1}^{NC} x_{i,\,j} = \sum_{j=1}^{NC} y_{i,\,j} = 1 \qquad (6)$$

y, por definición:

$$x_{i,j} = \frac{M_{i,j}}{Mt} \qquad (7)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$HL_i = \frac{HE_i}{Mt} \qquad (8)$$

La eficiencia de Murphree es definida según:

$$y^{*}_{i,j} = \frac{y_{i,j} - y_{i-1,j}}{\eta_{ij}} + y_{i-1,j} \qquad (9)$$

donde el asterisco significa composición en equilibrio.

Las propiedades fisicoquímicas comprenden, entre otras, la evaluación de la constante de equilibrio entre vapor y líquido y la funcionalidad de la entalpía específica con la composición, presión y temperatura, representada por:

$$y_{i,j} = K_{i,j}\ x_{i,j} \qquad (10)$$

$$HL_i = HL_i\ (x,\ P_i,\ T_i) \qquad (11)$$

donde la constante $K_{i,j}$, como hemos visto, es una función del tipo:

$$K_{i,j} = f\ (x,\ y,\ T_i,\ P_i) \qquad (12)$$

Las entalpías de líquido y vapor y las densidades son determinadas acorde a los métodos de estimación termodinámicos según corresponda, descritos en los Capítulos VII y VIII. Para utilizar las correlaciones correspondientes, la caída de presión por plato es determinada en cada instante *t* según:

$$\Delta P_i = P_{i-1} - P_i \qquad (13)$$

El flujo molar de líquido y vapor resulta función de la geometría del plato, el holdup de líquido y la caída de presión por plato:

$$V_i = f\ (\Delta P_i\ ,\ Mt_i,\ G,\ T_i,\ X_i,\ Y_i) \qquad (14)$$

$$L_i = f\ (\Delta P_i,\ Mt_i\ ,\ G,\ T_i,\ X_i) \qquad (15)$$

donde G representa las variables relacionadas con la geometría del plato.

Las funcionalidades indicadas en las Ecuaciones (14) y (15) son dependientes del tipo de plato utilizado. Existen numerosas correlaciones disponibles en la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

bibliografía y en los folletos de los proveedores. En un simulador de uso general se utilizan las más usuales y estándares. Para el caso del líquido existen simplificaciones útiles, por ejemplo la funcionalidad (15) puede expresarse en función del líquido retenido en los platos, según veremos más adelante (ecuación 21).

La ecuación (14) en cambio es más compleja e involucra las caídas de presión "a través del plato seco" y la presión hidráulica del líquido, ya que ambas sumadas compensan la caída de presión del vapor que atraviesa el plato. Por lo tanto, deben considerarse en los cálculos la altura del líquido sobre el plato, y la altura sobre el rebosadero. Para estos cálculos necesitamos, entre otras propiedades, las densidades y viscosidades de líquido y vapor, la velocidad de ascenso del vapor, etc. Aquí puede observarse con mayor claridad el requerimiento de la geometría del plato para poder llevar a cabo los cálculos mencionados, ya que las caídas de presión dependerán mucho de la misma, y la velocidad superficial de ascenso del vapor requiere conocer el diámetro del plato.

Según vimos, también puede plantearse, si se lo requiere, la consideración de la dinámica del tambor de reflujo y el rehervidor, ya que las ecuaciones planteadas son estrictamente válidas para cada etapa, excluyendo los mismos. Si por ejemplo tenemos el arreglo indicado en la Figura (XV. 2) para un condensador total, el holdup de materia por componente resulta:

$$\frac{dM_{j,Con}}{dt} = V_{1,j}\; y_{1,j} - (L_0 + D)\; y_{1,j} \qquad (16)$$

siendo D : destilado y L_0: reflujo.

Por otro lado, para el rehervidor se tiene:

$$\frac{dM_{Reb,j}}{dt} = L_N\; x_{B,j} - V_N\; y_{B,j} \qquad (17)$$

con $x_{B,\,j}$ representando las composiciones del producto de fondo, y V_N el caudal de vapor que sale del rehervidor, modificándose luego las ecuaciones correspondientes al "plato 1 y N" respectivamente.

También es posible considerar ecuaciones que representen distintos controladores, tales como proporcionales (P), proporcional-integral (PI) y proporcional-integral-derivativo (PID), utilizando, como se ha visto en el Capítulo anterior, las relaciones que correspondan a cada controlador y dispositivo de bombeo de fluidos que deba modelarse.

Como ya se ha expresado, las ecuaciones que representan la velocidad de reacción para el consumo y/o generación de cada componente son computadas algorítmicamente previa definición de los platos en donde hay reacción, el número de las mismas, la variación con la temperatura de las constantes cinéticas -consideradas

tipo Arrhenius, por ejemplo-, la forma de la expresión cinética si es no convencional, etc. Los términos de reacción $RE_{i,j}$ (moles reaccionados o producidos por unidad de tiempo y volumen de reacción, por cada componente) son calculados luego de haber obtenido el volumen de líquido retenido en los platos Vl_i (dividendo la masa liquida por la densidad de la mezcla).

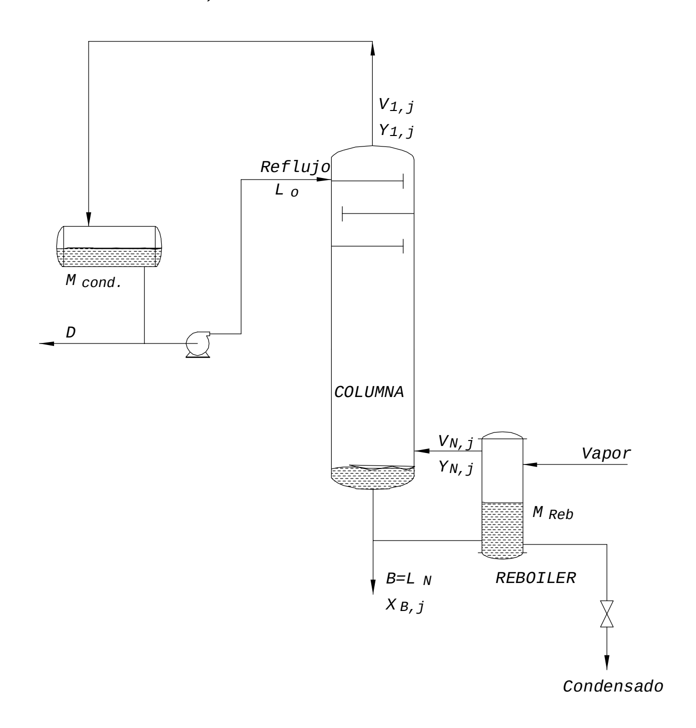


Figura XV.2

Para calcular los términos de reacción suponemos que pueden utilizarse expresiones cinéticas estándar:

$$RE_{i,j} = \left(\sum_{k=1}^{m} r_{i,k} \, \nu_{j,k} \right) Vl_i \tag{18}$$

donde m es el número de reacciones, $v_{j,k}$ son los coeficientes estequiométricos y la expresión $r_{i,k}$ (velocidad para cada reacción) resulta:

$$r_{k,i} = K_{D\,k,i} \prod_{j=1}^{NC} (x_{i,j}\,\rho_i)^{\alpha_{j,k}} - K_{I\,k,i} \prod_{j=1}^{NC} (x_{i,j}\,\rho_i)^{ß_{j,k}} \tag{19}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

con k de 1, ... ,m.

$\alpha_{j,k}$ y $\beta_{j,k}$ son los exponentes de reacción que podrán o no coincidir con los coeficientes estequiométricos, según el tipo de reacción química que se trate. K_D es la constante directa de reacción y K_I la constante de reacción inversa. La funcionalidad de las constantes de reacción con la temperatura pueden ser expresadas según:

$$K_{D\,k,i} = K_{0D\,k} \exp(\frac{-E_{D\,k}}{R\ T_i})$$
$$K_{I\,k,i} = K_{0I\,k} \exp(\frac{-E_{I\,k}}{R\ T_i}) \qquad (20)$$

donde K_{0D} y K_{0I} son los factores pre-exponenciales de ambas constantes respectivamente, en cada reacción (k), y E_{dk} y E_{ik} son las energías de activación de la reacción directa e inversa (k) respectivamente.

Planteadas las ecuaciones diferenciales y algebraicas que describen nuestro sistema, debemos ahora proponer una estrategia de resolución. A continuación se detallan los distintos ítemes que caracterizan las opciones de cálculo y metodologías de resolución del modelo base adoptado.

XV.2.2 Procedimientos de Cálculo

La solución de este complejo sistema de ecuaciones requiere robustos y apropiados métodos numéricos, ya que bajo ciertas condiciones las ecuaciones muestran comportamientos ultra estables o zonas de "stiffness" que demandan apropiados métodos para su resolución. En general, cuando el sistema es estable se emplean métodos "no-stiff". Estos métodos resultan explícitos, y son equivalentes a los adoptados generalmente al analizar la solución de los sistemas de ecuaciones hasta aquí vistos.

Para la solución de los sistemas de ecuaciones planteados en este modelo es necesario conocer cuándo el sistema es "no-stiff" o "stiff", para poder aplicar un método apropiado. Para el problema stiff, como mencionamos en el Capítulo XIII se deben utilizar métodos implícitos multi paso, o predictores-correctores, como Gear, Adams-Moulton , etc. Para el arranque de los métodos multipaso, o para las etapas no-stiff pueden utilizarse métodos explícitos como por ejemplo los pertenecientes a la familia de Runge-Kutta de cuarto orden, o superiores.

Obviamente, dado que se tiene un sistema de ecuaciones fuertemente no lineal, durante el proceso iterativo que se debe implementar en los métodos multipaso deben emplearse algoritmos eficientes (por ejemplo Newton Raphson) con adecuados puntos de inicialización. Además, debido a la estructura tridiagonal de la matriz,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

puede implementarse (como se ha visto en el Capítulo IV y X), métodos eficientes para la inversión del Jacobiano, de tal forma de minimizar el tiempo de cómputo para la integración de todo el intervalo de tiempo especificado.

Existen tres factores principales que afectan la selección de la longitud del paso en las rutinas de integración, y ellos son: requerimientos de exactitud, que dependen de los errores locales de truncado propios del método; limitaciones en la convergencia en la solución de la ecuación correctora en las etapas multipaso, y finalmente, limitaciones en estabilidad, dependientes de los límites de estabilidad propios de los métodos no-stiff utilizados. Para los métodos stiff, solamente una práctica real da un criterio de selección de la longitud del paso.

Dentro de este contexto, como hemos visto en varios ejemplos anteriores, dados los valores de las variables independientes, debemos calcular los miembros derechos de todas las ecuaciones diferenciales, de tal manera de calcular instante a instante la trayectoria de las mismas hasta satisfacer el tiempo máximo de simulación especificado. Si utilizamos un método implícito debemos utilizar además valores anteriores y una estimación del estado en tiempo posterior.

Por lo tanto, dados la composición y entalpía de la fase líquida (que se obtienen de dividir el holdup total por el holdup de cada componente, que es conocido en cada instante, al igual que el contenido entálpico total -ecuaciones 7 y 8-), debemos determinar la composición en la fase vapor, la temperatura y presión. Para ello, dados los valores de la eficiencia de Murphree (Ecuación 9), podemos utilizar las ecuaciones algebraicas que relacionan presión, temperatura, composición líquida y del vapor en equilibrio. Debemos remarcar aquí que en este modelo, la presión de operación de cada etapa es variable en el tiempo (Ecuación 13), por lo cual debe calcularse y no es un dato introducido por el usuario, como en el modelo estacionario propuesto en el Capítulo X. En otras palabras, ignoramos la presión y temperatura de cada etapa, sólo disponemos de la composición de la fase líquida y el contenido entálpico de la mezcla.

Para calcular la temperatura y presión de cada etapa, como ya se expresó, podemos recurrir a las relaciones algebraicas que surgen de plantear las condiciones de equilibrio, utilizando un método iterativo de cálculo. Esto es, se asume una estimación inicial de temperatura y presión, y aplicando algún método iterativo conveniente determinamos las composiciones de vapor en equilibrio y los valores de presión y temperatura correspondientes, dados la entalpía específica de la mezcla y la relación de equilibrio (Ecuaciones 10 a 12). Estos procedimientos son similares a los discutidos en el Capítulo IX para cálculo de temperatura de burbuja y rocío. Para recalcular la presión y temperatura puede ser usado el método de Newton-Raphson o de la secante (Ruiz, 1986), requiriéndose pocas iteraciones para alcanzar un valor satisfactorio, que debe ser suficientemente preciso ya que por ejemplo una mínima variación en la presión afecta profundamente la hidráulica del plato, pero no los valores entálpicos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Una vez determinada la temperatura y presión por cada etapa, según la ecuación (13) tenemos la caída de presión por etapa. A partir de ella, en función de las ecuaciones (14) y (15) se pueden calcular los caudales de vapor y líquido que se relacionan con la etapa correspondiente.

Sintéticamente, podemos resumir el procedimiento de cálculo de la siguiente manera (ver Figura XV.3):

1. Dados los valores de las masas retenidas de cada componente en el líquido, a partir de la ecuación (7), calcular las composiciones.
2. Dado el valor de la entalpía total retenida, calcular la entalpía específica del líquido, utilizando la ecuación (8).
3. Dadas la composición y la entalpía específica, y no conociendo la presión y la temperatura, necesitamos dos ecuaciones para su cálculo. Estas son las relaciones termodinámicas que vinculan la composición, temperatura y presión con la entalpía específica, y con la temperatura de burbuja (equilibrio líquido-vapor) (Ecuaciones 10 a 12).
   Se debe recordar que cuando la fase vapor es no ideal, para este cálculo debe procederse a métodos iterativos que suelen ser engorrosos (Capítulo IX).
4. Dadas las presiones en cada etapa, podemos calcular la caída de presión en las mismas (Ecuación 13).
5. Con la caída de presión y la masa de líquido retenida en cada etapa, podemos utilizar las Ecuaciones genéricas (14) y (15) para calcular los caudales de vapor y líquido relacionados con cada etapa. Por ejemplo, para el líquido podemos usar la Ecuación (21).
6. Disponiendo de las propiedades intensivas puede calcularse la densidad del líquido y por lo tanto el volumen retenido en cada etapa. Con estos datos y la temperatura, pueden evaluarse las expresiones cinéticas (Ecuaciones 18 a 20).

Ya comentamos que existen numerosas relaciones que vinculan los caudales de líquido y vapor pertenecientes a un plato con la retención de líquido y la pérdida de carga a través del mismo, respectivamente. Dado que se conocen en cada instante las propiedades físicas de las corrientes tales como densidades, viscosidad del líquido, etc. (todas en función de las composiciones, temperatura y presión de la etapa) y la retención total de líquido y la pérdida de carga a través del plato, pueden determinarse por un método iterativo los caudales de vapor y líquido en cada etapa (paso 5). Las correlaciones usadas en la determinación de las variables hidráulicas son mayormente empíricas, variando según sean correspondientes a platos perforados, diversos tipos de platos de válvulas y/o platos de campana de borboteo, etc.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

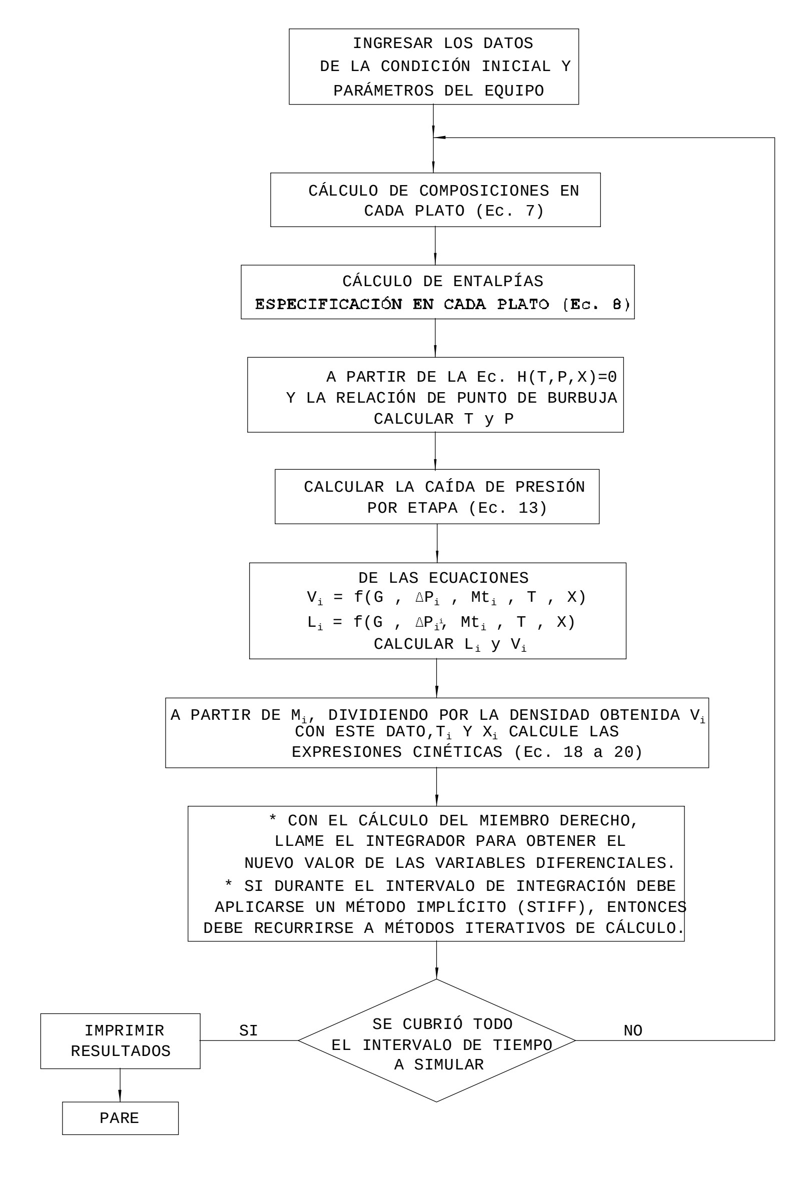


Figura XV.3: Diagrama de cálculo para resolver el sistema EDO.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Además de las ecuaciones mencionadas, pueden incorporarse otras que describen el comportamiento de controladores, si los hubiere. Como vimos en el capítulo anterior, los simuladores dinámicos de propósito general permiten incorporar al modelo los tres tipos de controladores más típicos en ingeniería química: control proporcional (P), proporcional-integral (PI) y proporcional-integral- derivativo (PID). Además, es posible en algunos de ellos también definir modelos de controladores más avanzados, e incorporarlos al simulador. De esta manera es posible evaluar la perfomance de diversos tipos de arreglos para controlar la columna (síntesis del sistema de control del equipo).

Hasta aquí, el modelo considerado sólo puede simular respuestas a lazo abierto, esto es sin ningún controlador actuando sobre el sistema. Las respuestas a ciertas perturbaciones provocadas sobre las variables críticas (las que se considera conveniente controlar) justamente permiten, por la teoría de control, identificar el sistema y determinar los parámetros de los diversos controladores a utilizar, por ejemplo proporcional, proporcional integral, proporcional integral derivativo, etc. (ver Capítulo XVI). También pueden proponerse controladores más complejos. Obviamente, el utilizar las respuestas del simulador como si fuesen las del equipo real (en el cual definitivamente actuará el controlador) exige que el modelo considerado sea lo más riguroso posible. Para ello hay que tener mucho cuidado con las hipótesis asumidas, y el caso específico analizado.

Si bien hasta ahora parece que han sido tenido en cuenta numerosos factores, todavía no hemos considerado diversos retardos en las cañerías, las áreas de intercambio en el condensador y hervidor, los tiempos muertos en los mismos, etc. Por lo tanto, todas las respuestas que se obtengan por medio de un simulador sólo deben ser tomadas como una indicación, un elemento más para considerar, pero nunca como el criterio definitivo. Esto es válido cualquiera sea la utilización que le demos a las simulaciones obtenidas, que como veremos más adelante, también pueden abarcar aspectos más complejos, con el objeto de auxiliar al operador en la supervisión del proceso en tiempo real, entrenamiento, o para identificar una falla mientras se desarrollan sus síntomas, en tiempo real.

La aplicación de la teoría de control al problema específico de columnas de destilación no es una tarea simple. En primer lugar se debe decidir qué se va a controlar, por ejemplo temperaturas del tope o del fondo, composición de líquido en algún plato, composición de vapor en algún plato, altura de líquido en el tambor de reflujo, altura de líquido en el fondo, temperatura o presión en algún plato, etc; también debemos determinar las variables a manipular, como ser la cantidad de calor al condensador, caudal de destilado o de reflujo, calor al rehervidor, caudal de vapor que sale del rehervidor, relación de reflujo, caudal de producto de fondo o destilado, caudal de alimentación, presión en el tope, en el fondo, o en varias etapas, etc.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Modelos simplificados

Si deseamos un modelo simplificado, respecto al que describimos recientemente, podemos pensar en varias alternativas (recordar los tipos de modelos especificados al principio de la Sección XV.2). Por ejemplo, podemos considerar la caída de presión entre etapas constantes. Es decir, que la presión de cada etapa se considera invariable en el tiempo, y un dato provisto por el usuario (control perfecto de presión en cada plato). En este caso, necesitamos proponer una nueva ecuación que vincule la caída de presión con el caudal de vapor. Por lo tanto, deberá reemplazarse el uso de la expresión (14) por una nueva estrategia para el cálculo del caudal de vapor en cada etapa.

Por otra parte, la ecuación (15), para calcular el caudal de líquido, puede simplificarse. En efecto, existen relaciones simples entre el holdup de líquido retenido en el plato y el caudal de líquido que abandona el mismo, por ejemplo la relación siguiente (Francis):

$$L_i = 3.33\ L_w\ (h_{ow})^{3/2} \qquad (21)$$

donde el caudal de líquido que abandona el plato (L_i) está dado en pies cúbicos por segundo, el largo del rebosadero (L_w) en pies, al igual que la altura de líquido sobre el mismo (h_{ow}).

En esta variante, por lo general se recurre a suponer un cambio instantáneo en el contenido entálpico de cada etapa, comparado con la dinámica de las composiciones. Por lo tanto, la ecuación diferencial correspondiente al balance de energía por cada etapa se convierte ahora en una ecuación algebraica. En otras palabras, se considera que los cambios en el contenido energético de cada etapa están "subordinados" a los cambios en el holdup de materia y los cambios en composiciones.

De acuerdo a esta nueva situación, el procedimiento de cálculo se modifica según el siguiente esquema:

1. Dadas las masas retenidas en cada etapa, calcular la masa total, y a partir de la Ecuación (7) calcular las composiciones en el líquido, en cada etapa.
2. Con el valor de la presión y las composiciones de líquido en cada etapa, calcular las temperaturas de equilibrio (cálculo de temperatura de burbuja).
3. Con las masas retenidas (holdup), aplicando la relación de Francis, calcular el caudal de líquido que abandona cada etapa, y las composiciones de vapor en equilibrio.
4. Con la temperatura y el volumen retenido en cada etapa (dividir la masa total retenida por la densidad de la mezcla), calcular la producción/desaparición de cada componente afectado por las reacciones químicas (ecuaciones 18 a 20).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

5. De la ecuación algebraica correspondiente al balance de energía, dado que conocemos las variables para calcular todas las entalpías de las corrientes líquidas y vapores, se pueden calcular, comenzando de la última etapa (el fondo), los caudales de vapor que abandonan cada etapa -ecuaciones (2) igualadas a cero-), una a una.

Obviamente, pueden plantearse nuevas simplificaciones, como por ejemplo, caudal de vapor constante a lo largo de la columna, holdup total de líquido constante (sólo varían las composiciones), etc. Es decir, los distintos métodos planteados al comienzo de la sección II. No obstante, no analizaremos aquí todas las variantes, considerando que las dos alternativas descritas son las más utilizadas para la simulación de columnas de destilación, ya sea considerando la hidráulica de platos, o bien despreciándola.

XV.3. EJEMPLOS DE APLICACIONES ESPECÍFICAS.

A continuación veremos en un ejemplo, algunos de los resultados posibles de obtener mediante el uso de un simulador dinámico. Una herramienta de este tipo, según analizamos en el Capítulo II, puede ser utilizada en varios aspectos de la tarea de un ingeniero de procesos, tanto para obtener conclusiones a partir de las trayectorias de ciertas variables como de los distintos estados estacionarios que se logren al perturbar apropiadamente las que se seleccionen para el análisis. Entre otras tareas, vimos que los modelos para simulación dinámica son necesarios para el diseño, optimización, síntesis de la estructura de control, análisis de operabilidad tales como puesta en marcha y paradas, análisis de fallas, etc.

En este ejemplo se estudiará un equipo de destilación reactiva, que como vimos en la sección de introducción, es una operación que logra la síntesis del reactor y la columna, obteniéndose grandes ventajas. Un caso de aplicación muy conocido de esta tecnología, entre otros, es la separación de isómeros del xileno por medio de alquilación selectiva. Tierney y Riquelme (1982), han estudiado la destilación reactiva de la mezcla de isómeros del xileno, como una alternativa de valor industrial en la separación de estos compuestos, de interés en la industria petroquímica. La técnica de separación se basa en la aplicación de una reacción selectiva cuyos productos poseen volatilidades relativas apreciablemente distintas, facilitando el proceso de separación, que de manera convencional, tendría grandes dificultades.

El proceso consiste en varias columnas de destilación, existiendo una columna reactiva con dos reacciones químicas en la fase líquida, y seis componentes. En efecto, la separación del meta-xileno y para-xileno es muy dificultosa por destilación convencional, debido a la muy baja volatilidad relativa entre los isómeros a separar. En esta tecnología, se butila selectivamente (por el butil-benceno terciario) uno de los isómeros, según el siguiente esquema de reacciones (ver en la Tabla XV.1 la identificación de los componentes):

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

A + B <----------> C + D
D + B <----------> C + E

En la Tabla XV.1 se muestran los parámetros utilizados para este problema, son individualizados los componentes y se detallan las características de la columna, así como también los datos necesarios de especificar para utilizar un simulador. En este caso particular se utiliza un programa de simulación dinámica para columnas de destilación tanto convencionales como reactivas, llamado READYS (ver Ruiz y col., 1995).

El proceso se lleva a cabo en una torre de diez platos, a los que sumándole el rehervidor y el condensador se obtienen doce etapas teóricas. La alimentación de los isómeros se realiza en el rehervidor (A_1), mientras que el agente butilante (A_2) se introduce en el segundo plato (considerando plato uno al tope). La composición en el tope (producto) de p-xileno duplica la de entrada, prácticamente libre de su isómero, m-xileno, y de los agentes butilantes. Se utilizó el paquete termodinámico de Chao-Seader, aunque la mezcla puede considerarse ideal. En forma resumida, a continuación se detallan los datos que se ingresan para la simulación:

Tabla XV.1
Características de la columna de destilación

Número de Platos	10
Número de Componentes	6
Tipo de Condensador	Total
Tipo de hervidor	Parcial
Presión de tope (Kpa)	5.9
Calor en Hervidor (KW)	154.3
Relación de Reflujo	2.0

Holdups promedio en estado estacionario (kgmol):

Condensador	0.000
Platos	0.045
Hervidor	0.072

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Condiciones de las corrientes de alimentación

Alimentaciones	A_1	A_2
Flujo de alimentaciones (Kmol/h)	7.89	12.19
Fracción líquida en la alim	1.0	1.0

Composición de las alimentaciones (fracción molar) e identificación de los componentes:

		A_1	A_2
Comp. A	di-ter-butil Benceno	0.842	0.000
Comp. B	m-Xileno	0.158	0.470
Comp. C	tert-butil m-Xileno	0.000	0.000
Comp. D	tert-butil Benceno	0.000	0.000
Comp. E	p-Xileno	0.000	0.000
Comp. F	Benceno	0.000	0.530

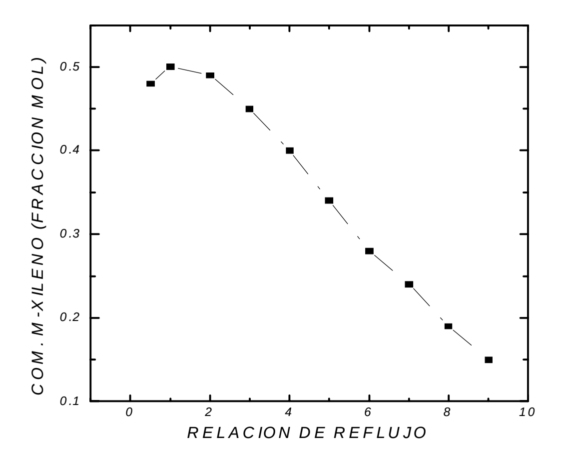


Figura XV.4: Composición de m-Xileno vs. Relación de Reflujo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Si procedemos a la asignación de los parámetros indicados a un simulador dinámico que tenga implementado un modelo como el descrito anteriormente, es posible lograr resultados como los que a continuación se discuten. Por ejemplo, en la Figura 4 se muestra un análisis de la variación de la composición de tope en función de la relación de reflujo.

En general este tipo de curvas se utiliza para obtener una relación entre la pureza obtenida y la inversión necesaria, tanto desde el punto de vista de los servicios asociados al hervidor y condensador, como el diámetro necesario en la columna. Generalmente, en la tarea de diseño se utiliza en los primeros cálculos, como ya se ha mencionado, una serie de reglas del arte o heurísticos, por ejemplo, que la relación de reflujo óptima es el reflujo mínimo multiplicado por un cierto factor. Cuando más pequeño el factor, más se favorece la reducción del consumo energético, en detrimento de la inversión.

Sin embargo, en destilación reactiva la evolución de la curva pureza vs. relación de reflujo, así como otras relaciones importantes, no necesariamente seguirán las mismas leyes que en destilación convencional, ya que los sistemas a separar se comportan de una manera no lineal. Por lo tanto, para tomar una decisión definitiva, es aconsejable el análisis exhaustivo de la curva, lo cual es muy fácil utilizando ya sea un simulador estacionario como dinámico. En este último caso, basta con encontrar un estado estacionario y perturbar al mismo con sucesivos escalones en la relación de reflujo. Obviamente, para construir la gráfica mostrada en la Figura XV.4, *sólo importa el estado estacionario final, y no las trayectorias temporales.*

Por otro lado, en la Figura XV.5 se muestran las diferencias entre los perfiles de una simulación obtenida con el modelo que tiene en cuenta la variación de presión a uno que asume la presión constante.

En este caso, puede apreciarse que los *perfiles estacionarios* no son muy distintos, resultado que era de esperar ya que la presión en cada plato en la columna es muy similar, ya sea habiendo considerado la opción rigurosa de la caída de presión o bien asumida la misma al inicio de la simulación y mantenida constante a lo largo del cálculo. Dado que la composición de equilibrio y la entalpía de las corrientes se altera mínimamente debido a pequeñas variaciones de la presión, los perfiles resultarán muy similares, como vemos, para el estado estacionario hallado. Generalmente, lo que se hace es recalcular con el perfil hallado (simplificado) la caída de presión correspondiente (considerando el plato real) y compararlo con las caídas de presión supuestas. Luego puede reinicializarse la simulación, a los efectos de lograr una mayor aproximación en cuanto a los perfiles de presión, ya que como mencionamos, los perfiles de composiciones serán muy similares en ambos casos. Este cuadro puede alterarse si consideramos sistemas al vacío, por ejemplo.

Dentro de este contexto, resulta justificado cuando se utiliza un simulador estacionario asumir la presión constante a lo largo de toda la columna, y luego, con los perfiles de composición, temperatura y caudales, calcular la caída de presión

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

mediante el diseño de los platos correspondientes. Esto es una práctica usual. Sin embargo, cuando se analizan *trayectorias dinámicas*, en particular cuando se estudia una política de puesta en marcha o parada, las variaciones de las propiedades de todo tipo (sobre todo las hidráulicas) son muy importantes, afectando muy particularmente la presión de cada etapa, que está directamente relacionada con los caudales de vapor y retención de líquido en las mismas. En este caso, la variación de presión a lo largo del tiempo resulta muy importante, y afecta directamente a la trayectoria de las demás variables, tanto intensivas como extensivas (Ruiz, 1986). La necesidad de considerar estos factores en una simulación se incrementa, como ya se remarcó, en torres de destilación que operan a vacío.

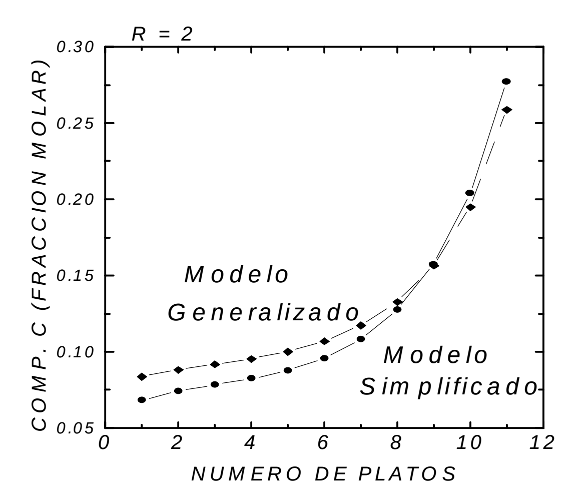
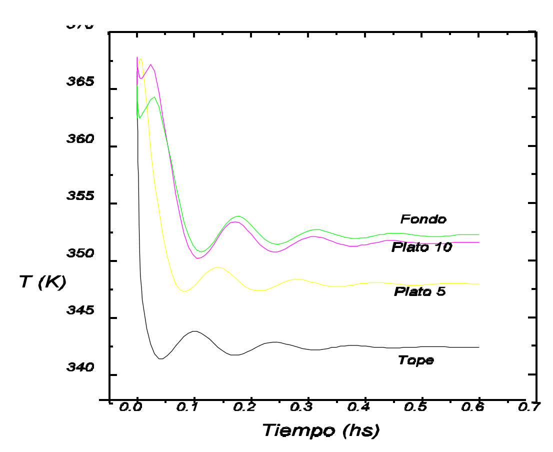


Figura XV.5 : Perfil de composición de tope a presión constante y presión variable. Comparación entre los modelos simplificado y riguroso.

Por último, si se trata de analizar el comportamiento o diseño de un lazo de control de presión, resulta evidente que debemos considerar como variable temporal la variación de la misma, debiéndose utilizar el modelo apropiado. En definitiva, los resultados obtenidos utilizando uno u otro modelo (simulador) serán siempre útiles sujeto a que el usuario tenga bien en claro las hipótesis subyacentes, el objetivo de la simulación, y la inversión o tiempo y esfuerzo de cálculo que se tolere o disponga.

Finalmente, en la Figura XV.6 se muestra la trayectoria de las temperaturas del sistema ante una inicialización a perfil constante. Aquí las trayectorias no son de utilidad; sí los estados estacionarios hallados.



FiguraXV.6: Trayectorias de la temperatura en función del tiempo.

XV.4 DESTILACIÓN BATCH

La destilación batch, como sabemos, es una operación muy común en un innumerable conjunto de procesos. Se utiliza generalmente para procesar pequeños volúmenes de productos, en cuyo caso los procesos batch son los más convenientes. Cuando esta operación es ventajosa desde el punto de vista de la cantidad a procesar, se obtienen ventajas adicionales en su uso. Por ejemplo, se gana mayor flexibilidad. En efecto, para la separación de una mezcla multicomponente, como hemos visto en el Capítulo II, se necesita en procesos continuos, si se requiere la separación completa de la mezcla de NC componentes, (NC - 1) columnas de destilación. Dado que aquí la separación se realiza en una secuencia temporal, sólo es necesaria una columna, separando la mezcla componente a componente, a medida que transcurre el tiempo de procesamiento.

Por definición, en una columna de este tipo, toda la operación es en estado transiente. Esto es, las temperaturas, composiciones, presiones, holdups, caudales, etc., varían instante a instante a lo largo de toda la operación. Es por ello que aquí resulta más difícil diferenciar la etapa de puesta en marcha, ya que la columna operará en estado transiente durante todo el proceso. Sin embargo, desde el punto de vista operacional es necesario distinguir la etapa de puesta en marcha, en la cual no se obtienen productos, a la del régimen de operación normal, en la cual se comienza con la obtención de los productos, aunque el caudal, temperatura y/o composición de los mismos varían instante a instante.

Desde este punto de vista, existen numerosas variantes o políticas de operación. Por ejemplo, operar a reflujo constante o a reflujo variable. Además, en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

esta última opción deberá especificarse la ley de cambio óptima para optimizar el proceso. Existen también numerosas variantes desde el punto de vista estructural. Destilación batch con recipiente intermedio, la llamada destilación batch invertida, etc. Todas estas alternativas resultarán o no convenientes para cada caso particular, y es tarea del diseñador encontrar la más apropiada. Nuevamente, el uso de un simulador es muy conveniente para la toma de decisiones. Aquí se aplican las mismas discusiones acerca de las hipótesis a realizar y los métodos útiles para la simulación. En efecto, existirán modelos rigurosos, semi-rigurosos y simplificados al igual que para el caso continuo. El uso de cada uno será adecuado según las circunstancias. Por ejemplo, si se debe analizar si una política dada de operación será factible o no en función de las restricciones que imponen factores tales como posibilidad de inundación, arrastre, fluctuaciones inaceptables en la presión de operación, limitaciones en las áreas de trasferencia tanto en el condensador como el hervidor, etc, no puede utilizarse un modelo simplificado.

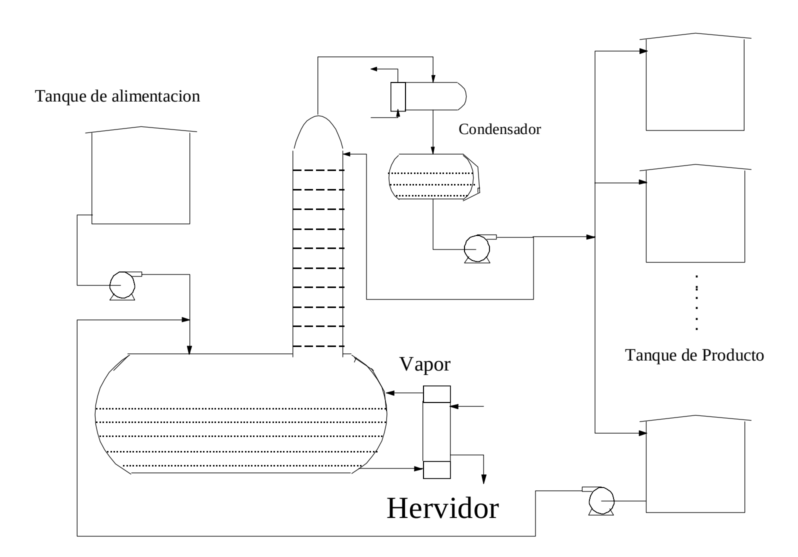


Figura XV.7: Esquema de un destilador *Batch*

En la Figura XV.7 se muestra un diagrama esquemático de un típico arreglo para destilación batch. En la bibliografía se ha discutido suficientemente la forma de modelar este proceso, por ejemplo en (Holland y Liapis, 1983). En general se puede considerar que existen dos pasos consecutivos: Llenar el hervidor con la mezcla a ser separada y comenzar con el calentamiento hasta que el sistema alcanza el estado

estacionario, sin producir destilado alguno (esto es manteniendo una relación de reflujo total o infinita). Luego de cumplida esta etapa, comenzar con la producción de destilado, especificando un reflujo finito (aquí pueden considerarse dos políticas, una manteniendo en todo tiempo el reflujo especificado, otra variando a través del tiempo el reflujo de acuerdo a una ley especificada). Debe tenerse presente que entre todas las posibles, seguramente existirá una que sea óptima según algún criterio especificado.

Debe remarcarse en este punto que a medida que transcurre el tiempo, en el hervidor se concentra la masa retenida en los productos más pesados, mientras que en el tambor de producto se acumula el más liviano. La composición del destilado es variable, ya que así lo son todas las composiciones de la columna. Por lo tanto, cuando hablamos de especificaciones de diseño, se refiere a la composición de la mezcla total acumulada en el tanque de producto. Dado que a medida que trascurre el tiempo cambia la composición del producto, una vez que el mismo se aproxima al agotamiento, comenzará a aumentar la concentración de los subsiguientes más pesados, contaminando el producto más liviano, o corte actual. Por lo tanto, hay que establecer una política de derivación del destilado producido a otro recipiente, o tanque acumulador, para los sucesivos cortes a producir, cada uno con la especificación establecida o deseada. Es evidente que aquí pueden plantearse diversas políticas óptimas, como ser mínimo tiempo para satisfacer la tarea, máxima pureza en algún corte intermedio (producto de valor) al mínimo tiempo, etc. Durante este proceso, pueden existir cortes intermedios que no satisfagan las especificaciones, por lo que deberán reciclarse y procesarse nuevamente, considerar extracciones laterales en cierto período de tiempo, alimentar parcialmente el hervidor transcurrido cierto tiempo de operación con alimentación fresca, o bien con los cortes intermedios, mezclar ciertos cortes para obtener un producto aceptable dentro de ciertos márgenes en la composición deseada, etc. (Chiotti, 1989).

Genéricamente, se conoce a la primera etapa, en la cual se alcanza el régimen a reflujo total, como el período de arranque, y a la etapa posterior, la etapa de producción. Desde el punto de vista de la simulación, el período de arranque es evidentemente el más discontinuo de las dos etapas, debido a que los acomodamientos hidráulicos imponen variaciones bruscas de caudales y presiones en la columna, afectando esto también a las variables termodinámicas. Por lo tanto aquí caben las mismas consideraciones analizadas para el modelado de columnas de destilación operando en forma continua. Obviamente, para simular esta etapa resulta imprescindible, si se requieren resultados adecuados, utilizar modelos tipo CHE.

Ya en los años 1950 se publicaron los primeros trabajos para el modelado de torres de destilación operando en forma batch. Por ejemplo, (Meadows, 1963) presentó uno de los primeros modelos para destilación batch multicomponente. Aquí no nos ocuparemos de analizar profundamente las propuestas existentes en la bibliografía. Al igual que para el modelado de equipos de destilación continuos, existe

una gama de modelos en los cuales se adoptan simplificaciones similares a las mencionadas a principios de la Sección 2.

Sólo mencionaremos que se puede obtener el modelo de este tipo de operación, realizando algunos cambios sencillos al sistema de ecuaciones utilizado para el modelo dinámico de un equipo de destilación continuo y/o en las especificaciones realizadas. En efecto, una columna batch no tiene alimentaciones. Por otra parte, el holdup de líquido en el hervidor será considerablemente mayor que los restantes platos y el condensador. Todo ello no introduce complicaciones a las ecuaciones anteriormente planteadas. Obviamente, serán parte de las condiciones iniciales (datos) el holdup del hervidor y la composición, la temperatura y el estado de agregación de la mezcla en él contenida. También aquí podrán especificarse distintos tipos de arreglos de controladores, según la política de operación especificada.

Con respecto a las hipótesis adoptadas, obviamente son las mismas que originaron el sistema de ecuaciones correspondientes a una columna continua. Por ejemplo, puede considerarse a la presión variable, o bien constante, y asumir que la columna se encuentra en estado estacionario a reflujo total, como condición inicial.

En función de esta última hipótesis, el modelo está orientado a simular sólo el período de producción. Resulta fácil la inicialización debido a que una simulación estacionaria del sistema a reflujo total y las especificaciones que correspondan a la operatoria a simular resultan suficientes (se evita la simulación de la etapa de arranque que es la más dificultosa).

Una ventaja de este modelo, cuando resulta factible su aplicación, es la simplicidad de su implementación. Obviamente, su utilidad resulta limitada a casos particulares, en los cuales todas las hipótesis subyacentes son apropiadas. Aquí nuevamente resulta importante remarcar que en la gama de tareas de un ingeniero de procesos, siempre existirán ejemplos en los cuales un modelo resultará útil, y muchos otros en los cuales resultará decididamente inadecuado.

Ejemplo: Simulación de una operación de arranque en columnas continuas con múltiples estados estacionarios.

Aquí analizaremos dos casos, uno reportado en la bibliografía para una columna binaria por Jacobsen and Skogestad (1991), y el otro es un ejemplo académico de destilación reactiva, con seis componentes y tres reacciones supuestas en la fase líquida, reportado por Schenk y col. (1994). Los detalles de ambas columnas se dan en las Tablas II y III.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Tabla II: Caso de estudio I (Jacobsen y Skogestadt (1991))

Componentes:	A: Metanol	B: Propanol
Platos:	8	
Condensador	Total	
Alimentación:	Plato: 4 Composición: A: 0.5	Flujo: 132 lb-mol/hr. B: 0.5
Método termodinámico:	UNIFAC	

Tabla III: Caso de estudio II (Schenk, Ruiz y Scenna (1994))

Componentes:	A: Etileno B: Etano C: n-Butano	D: i-Butano E: Propileno F: Metano
Platos:	13	
Condensador	Total	
Alimentación:	Plato: 6 Composición: A: 0.5 B:0.5 C: 0.0	Caudal: 132 lb-mol/hr. D: 0.0 E: 0.0 F: 0.0
Método termodinámico:	Chao-Seader Grayson-Streed	

Caso I (mezcla binaria).

La columna separa metanol de propanol, con ocho platos incluyendo el reboiler y el condensador. La alimentación consiste en líquido saturado que entra en el plato cuatro. Dadas las condiciones de la alimentación, tenemos dos grados de libertad, que cubrimos mediante las especificaciones del caudal de vapor producido en el hervidor (V o boild-up) y el caudal líquido reflujado a la torre (L).

Procediendo como analizamos en el Capítulo X obtenemos el diagrama de histéresis indicado en la Figura XV.8 (donde el parámetro de bifurcación es el caudal reflujado). Todos los datos de este ejemplo están tomados de (Scenna y col.,1997), y el simulador utilizado es el READYS, cuya descripción puede encontrarse en (Ruiz y col., 1995). Nuestro objetivo aquí es el estudio de la influencia de distintas políticas de arranque en el estado estacionario final alcanzado. Como lo indica la Figura XV.8, para el valor dado de L (970 Lbmol-hora), tenemos dos posibles soluciones para X_A. En la Figura XV.9 indicamos muy esquemáticamente la estructura de la columna, en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la cual se muestra una potencial alimentación extra.

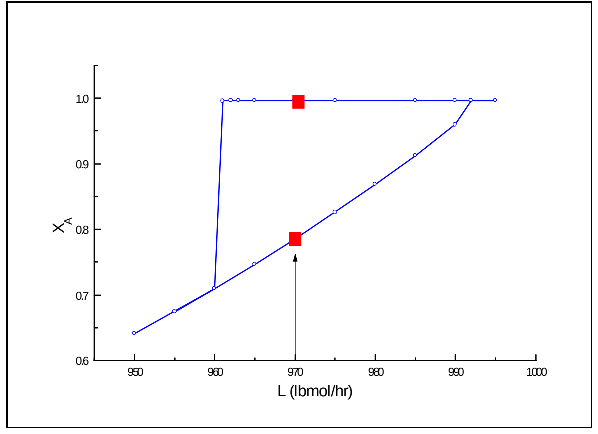


Figura XV. 8: Múltiple soluciones para la columna binaria

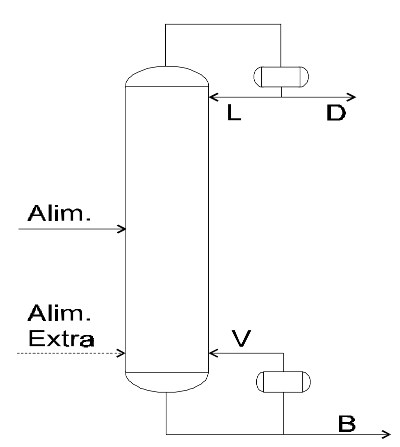


Figura XV.9: Esquema de la columna presentada para el caso I.

En efecto, existen muchas políticas de arranque, aquí solo mencionaremos algunas, no las óptimas, sino las convencionales desde el punto de vista general de esta operatoria, para estimar el estado final alcanzado. Si consideramos un arranque manual (no automático, esto es controlado por una computadora), debemos realizar una serie de manipulaciones de válvulas y comandos para llevar la columna, desde el estado inicial (vacía), hasta el estado estacionario deseado. En general, podemos

distinguir tres etapas en el arranque. En la primera, a partir de la columna vacía se alimenta con la(s) alimentación(es) hasta que se alcance un estado de estabilidad hidráulica, esto es, que exista un hold-up adecuado en los platos y que exista un caudal de vapor y de líquido en toda la columna. En esta etapa es en la cual se producen las modificaciones más importantes en las variables hidráulicas (presión, caudales, etc.), y debe por lo tanto utilizarse para su simulación un simulador riguroso. Esta etapa dura poco tiempo, comparada con las siguientes (ver Ruiz, 1986). Por lo general se la realiza a reflujo total, de tal forma de lograr una recirculación de líquido a la columna y además no perder destilado fuera de especificación. Cuando disponemos de hold-up de líquido suficiente en el hervidor se puede introducir (a través de sucesivos escalones) la cantidad de vapor de calefacción necesaria para lograr la corriente de vapor. Lógicamente, sabemos el estado estacionario deseado, por lo que la política de asignación de perturbaciones a lo largo del tiempo para llegar al valor de consigna es justamente lo que estamos analizando. Mientras esto sucede, y funcionando a reflujo total, una vez superada la etapa de estabilización hidráulica, la columna comienza lentamente a separar los componentes livianos de los pesados, generándose el perfil de temperaturas y composiciones. Por lo general, el tiempo que se tarda para llegar al estado estacionario deseado es bastante mayor al de la primera etapa, pudiendo ser de horas hasta más de un día. Una forma de medir la distancia del estado en cada tiempo y el estado estacionario o consigna (perfil de temperaturas por ejemplo) es calcular la norma o distancia entre la curva a todo tiempo y la curva a estado estacionario. Este criterio puede darnos una idea de cómo evoluciona la puesta en marcha, ya que se arribará al estado estacionario cuando tal distancia sea cero. Es este momento también, o uno muy próximo al mismo (tolerancia) el que nos indica que ya podemos pasar del estado de arranque al estado de control convencional. Hecho esto, la columna queda bajo el comando de los controladores, y podemos decir que la puesta en marcha ha finalizado.

El problema que se plantea normalmente, es encontrar cuál es la política óptima, esto es, minimizar el tiempo de arranque, el material fuera de especificaciones, etc. Para ello, como vimos, existen infinitas combinaciones de secuencias de escalones para manipular el vapor de calefacción entregado, y el pasaje desde reflujo total al que corresponde al estado estacionario. También como vimos, podemos utilizar la alimentación normal o bien una extra, solo en el período de estabilización hidráulica, de tal manera de facilitar la formación de un holdup líquido en los platos inferiores y hervidor.

Entonces, podemos llamar política a una estructura (conexión de las alimentaciones, control o no de los niveles en condensador y hervidor, etc) y a una secuencia ordenada de valores a través del tiempo para las variables reflujo y calor introducido, por ejemplo, según lo indicamos en la Figura 10.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

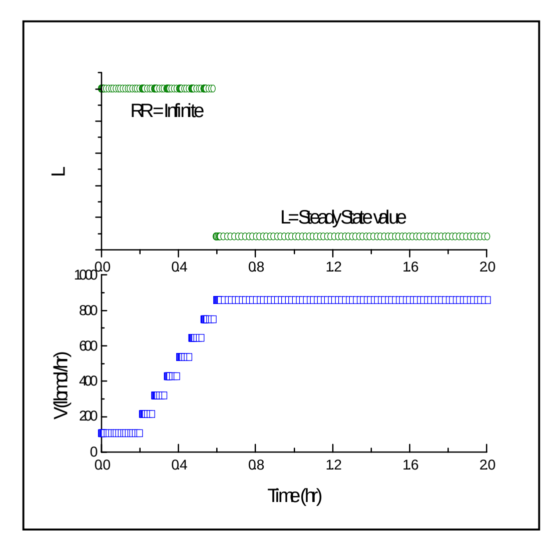


Figura XV.10: Política de Perturbaciones en el calor del rehervidor

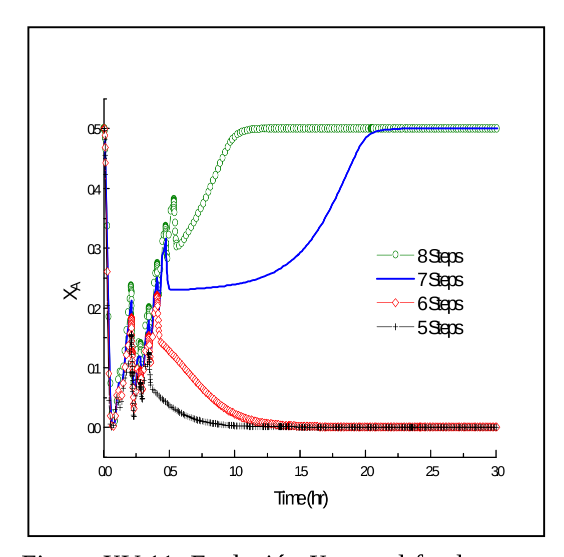


Figura XV.11: Evolución X_A en el fondo, para cuatro diferentes políticas de arranque (Fig. 10).

Las políticas empleadas tienen como resultado las evoluciones indicadas en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

la Figura 11. En este caso se ha mantenido durante el arranque el esquema de alimentación convencional o de diseño, llenando los platos a partir de su estado vacío, y produciendo una serie de escalones al vapor de calefacción hasta que se llegue al valor de carga estacionario. A partir de allí, el reflujo es llevado desde el valor total hasta el que corresponde al estado estacionario.

Como puede observarse, existe un punto de bifurcación (entre la política de seis a siete escalones) que nos lleva de un estado estacionario a otro. Esto implica que si adoptamos diferentes políticas de arranque, en función de la distribución en el tiempo de la asignación de energía en el hervidor, podremos lograr uno u otro de los estados estacionarios potenciales, que según el modelo, posee la columna bajo análisis.

Caso II. -sistema reactivo-

Para el caso de la columna reactiva, procedemos de la misma manera. En primer lugar, como se describe en (Schenk y col., 1995) se obtiene la curva de histéresis como ya se ha descrito, y se indica en la Figura XV.12.

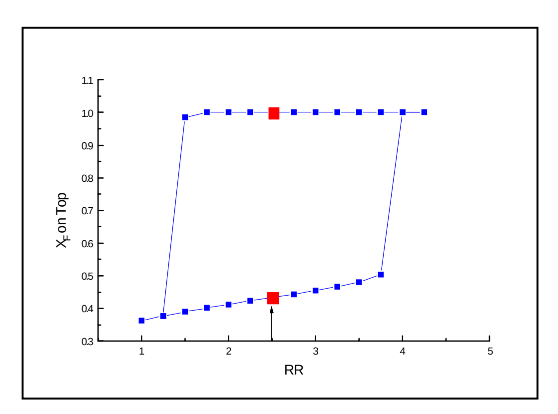


Figura XV.12: Lazo de histéresis para el Caso II

Nuevamente, se observan dos potenciales soluciones en estado estacionario. Nuestro objetivo, igual que antes, es analizar si mediante técnicas sencillas y comunes de arranque podemos alcanzar alguno de ellos en detrimento del otro. Para ello, en este caso nuevamente utilizamos el simulador READYS; con los parámetros indicados en la Tabla III.

En la Figura XV.12 vemos que para una relación de reflujo podemos encontrar dos estados de operación distintos, uno de alta conversión y otro de baja conversión de los reactivos. Aquí estudiaremos el efecto de distintas políticas, por ejemplo, para el calor del reboiler especificado en 106 Btu/hr y la relación de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

reflujo en 2.5. En esta situación, cuál estado estacionario es alcanzable?

En primer lugar simulamos una estrategia de arranque similar a la anterior (una sola alimentación, la del estado estacionario), en la cual el calor del hervidor es incrementado a través de sucesivos escalones, hasta llegar al estado estacionario. Alcanzado éste, la relación de reflujo, que era infinita se lleva al valor correspondiente al estado deseado. Como resultado, aunque se utilicen diferentes estrategias, solo el estado de alta conversión es alcanzado, no pudiéndose lograr la otra solución bajo esta política.

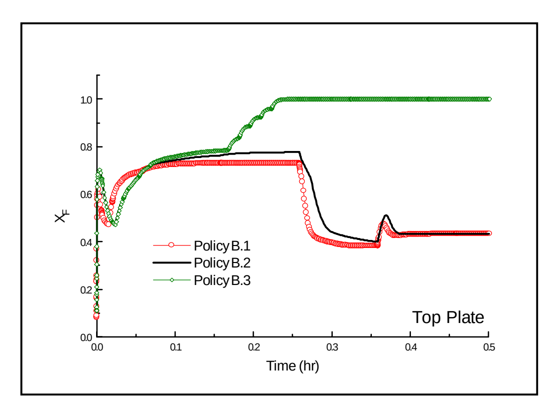


Figura XV.13

Por otra parte, si adoptamos una política en la cual disponemos de una alimentación auxiliar (en el plato de tope) durante el procedimiento de arranque, y procedemos con una serie de opciones en los escalones correspondientes a las variables manipuladas, como en los anteriores casos, obtenemos el otro estado estacionario, según se indica en la Figura XV.13. En efecto, en este caso, dependiendo de los escalones utilizados en la carga del hervidor podemos llegar a uno u otro estado estacionario, lo cual nos permite encontrar una estrategia de puesta en marcha que discrimine entre ambos estados. Obviamente, todo ello sujeto a las hipótesis asumidas en el modelo. La prueba definitiva debería ser experimental.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Barbosa, D. and Doherty, M. F., "The influence of equilibrium chemical reactions on vapor-liquid phase diagrams", Chem. Engng. Sci., 43, 529-40, 1988.
- Bekiaris N., G.A. Meski, C.M. Radu and M. Morari, "Multiple Steady States in Homogeneous Azeotropic Distillation", Ind. Eng. Chem. Res. 32, 2023 - 2038 (1993).
- Bekiaris N., G.A. Meski and M. Morari, "Multiple Steady States in Azeotropic Distillation and their Effect on Column Operation and Design", Proc. 4th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Chemical Reactors, Distillation Columns and Batch Processes, Copenhagen, Denmark, June 7-9 (1995).
- Benz S. J. and N. J. Scenna, "Influence of the Models in Obtaining Multiple Solutions", J. Can. Chem. Eng., in press (1997).
- Berman S., Isbenjian H., Sedoff H. and Othmer D., Esterification. Continuous production of dibutyl phthalate in a distillation column", Ind. Eng. Chem, 40, 2139-48, 1948.
- Chavez R., J.D. Seader and T.L. Wayburn, "Multiple Steady-State Solutions for Interlinked Separation Systems", Ind. Eng. Chem. Fundam. 25, 566-576 (1986).
- Davies B. Ph. D. Thesis, University of Aston, Birmingham, 1971.
- Dilfanian S. Ph. D. Thesis, University of Aston, Birmingham, 1978.
- Doherty M.F. and Buzad G., "Reactive Distillation by Design", Trans. IChemE, 70, part A, 1992.
- Doherty M. F., and Perkings, J., D., “On the dynamics of Distillation Processes -IV. Uniqueness and Stability of the steady state in Homogeneous Continuous Distillation”, Chem. Eng. Sci., 37, 381-392 (1982).
- Domenech, S. and M. Enjalbert, Comp. Chem. Eng, 5, No. 3, p. 181 (1981)
- Duprat F. and Gau Georges, "Reactive Distillation of Pyridine Mixtures with an Organic Acid. II. Parametric Sensitivity and Optimization of the Process", The Canadian Journal of Chemical Engng, 69, 1991.
- Duprat F, Gassend R. and Gau G., "Reactive Distillation Process optimization by empirical formulae construccion", Comp. Chem. Engng., Vol. 12, Nro. 11, pp. 1141-49, 1983.
- Espinosa, J., Scenna, N. J., Pérez, G., "Graphical Procedure for Reactive Distillation systems", Chem. Engng. Comm., 1992.
- Gaikar V. and Sharma M.M., "Separations through reactions and other novel strategies", Sep. Purif. Meth., 18, 111-176, 1989.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Gani, R., C. A. Ruiz and I. T. Cameron, IChemE Symp. Ser., 92, p. 353 (1985).
- Gani R., Ruiz C.A. and Cameron I.T., "Studies in the Dynamics of Startup and Shutdown Operations of Distillation Columns", Proc. Chemical Engineering Fundamentals Conference 87: The Use of Computers in Chemical Engineering, Taormina, Italy (1987).
- Gani R. and S.B. Jorgensen, "Multiplicity in Numerical Solution of Non-Linear Models: Separation Processes", Comput. Chem. Eng. 18(Suppl), S55-S61 (1994).
- Gassend R., Dupratt F., Gau G., "Separation of Alcools by Reactive Distillation in the Presence of Amines", Nouv. J. Chim., 9, 703-705, 1985.
- Gau G., "Method for Separating Hydrocarbons Especially Aromatic Hydrocarbons and Installations Therefor", U.S. Patent 3.849.261, 1974.
- Grosser J., Doherty M., Malone M. F., "Modeling of Reactive Distillation Systems", Ind. Eng. Chem. Res., 26, 983-989, 1987.
- Helfferich F. G., "Multiple Steady States in Multicomponent Countercurrent mass-Transfer Processes", Chem. Engng. Sci, 48, 4, 681-686 (1993).
- Jacobs R. and R. Krishna, "Multiple Solutions in Reactive Distillation for Methyl tert -Butil Ether Synthesis", Ind. Eng. Chem. Res. 32, 1706-1709 (1993).
- Jacobsen E. W.. and S. Skogestad, "Multiple Steady States in Ideal Two-Product Distillation", AIChE J. 37, 499-511 (1990).
- Kienle A. and W. Marquardt, "Bifurcation Analysis and Steady State Multiplicity of Multicomponent, Non-equilibrium Distillation Processes", Chem Eng Sci. 46, 1757-1769 (1991).
- Jaswal I., Kalev P., U.S. Patent 3.900.450, 1975
- Leyes C., and Othmer D., "Continuous Esterification of butanol and acetic acid, Kinetic and distillation consideration", Trans. AIChE, 41, 157-196, 1945.
- Hauan S., T. Hertzberg and K.M. Lien, "Why Methyl tert-Butil Ether Production by Reactive Distillation May Yield Multiple Solutions", Ind. Eng. Chem. Res. 34, 987-991 (1995).
- Magnussen T., M.L., Michelsen and A. Fredenslund, "Azetropic Distillation Using UNIFAC", Inst. Che. Eng. Symp. Ser. 56, 4.2/1-4.2/19 (1979).
- Nijhuis S.A., F.P.J. M. Kerkhof and A.N.S. Mak, "Multiple Steady States during Reactive Distillation of Methyl tert-Butil Ether", Ind. Eng. Chem. Res. 32, 2767-2774 (1993).
- Meadows, E. L., Chem. Eng. Progr. Symp. Ser., 59, No. 46, p. 48 (1963)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Nocca J. L. Leonard J. Gaillard J and Amigues P., U.S. patent 4.847.431, 1989.
- Ruiz, C. A.,"Desarrollo de una Política de Control para Operaciones de Puesta en Marcha de Columnas de Destilación", Ph.D. Chem. Eng. Thesis, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca, Argentina (1986).
- Ruiz C.A., Cameron I.T. and Gani R., "A General Dynamic Model for Distillation Column. Part III: Study of Startup Operations", Computers and Chem. Engng. 12, No. 1, p. 1-14 (1987)
- Ruiz, C.A. and Gani R., "Dynamic Simulation and Design of Distillation Columns, Part II: Single Column Startup and Shutdown Strategies", Lat. Am.Res., 20, 113-128 (1990).
- Ruiz C.A., M.S. Basualdo and N.J. Scenna, "Reactive Distillation Dynamic Simulator", Trans. Inst. Chem. Eng., Part A, 73, 363- 378 (1995).
- Sawistowsky H. and Pilavakis P., "Performance of esterification in a reaction distillation column" Chem. Eng. Sci, 43, 355-360, 1988.
- Sawistowsky H. and Pilovakis P., "Distillation with chemical reaction in a packed column" IChemE Symp. Ser. 56, 4.2/49-63, 1979.
- Sharma M. M., "Separations throuth Reactions" J. Separ. Proc. Technol., 6, 9-16, 1985.
- Scenna N. J., Ruiz C. A. and S.J. Benz, "Dynamic Simulation for the Startup operation of Reactive Distillation Columns", Proc. Enpromer '97, Bahía Blanca, Argentina, 425-426 (1997).
- Schenk M.A., C.A. Ruiz and N.J. Scenna, "Un Análisis de Multiples Soluciones en Destilación Reactiva Considerando Gradientes de Presión", Proc. 4to Congreso Argentino de Ingeniería Química., Santa Fe, Argentine, October 18-20 (1994).
- Smith L., U.S. Patent 4.307.254, 1981.
- Terril D., Sylvestre F. and Doherty F. M., "Separation of Closely Boiling Mixtures by Reactive Distillation 1. Theory", Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev. 24, 1062-1071, 1985.
- Tierney J. W. and Riquelme G. D., "Calculations methods for Distillation systems with Reaction", Chem. Eng. Commun. Vol 16, pp. 91-108, 1982.
- Yuxiang Z. and Xien X., "Study on Catalytic Distillation Processes. Part II, Simulation of Catalytic Distillation Processes. Quasi-Homogeneous and Rate based model", Trans IChemE, vol 70, part A, 1992.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Franks, R. G. E. and John Wiley, “Mathematical Modeling in Chemical

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Engineering”, Sons Inc. NY - 1965.
- Franks, R. G. E. and John Wiley, “Modeling and Simulation in Chemical Engineering”, Sons Inc. NY 1972.
- Luyben, W. L.,”Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineering”, 2nd. edition, 1990, McGraw-Hill Chemical Engineering Series.
- Holland, C. D., "Fundamentals of Multi-Component Distillation ", McGrow-Hill, N.Y., 1981
- Holland, C. D. and A. I. Liapis, "Computer Methods for Solving Dynamic Separation Problems", p. 188, McGraw-Hill, New York (1983)

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Qué sucede si el hold-up de vapor debe considerarse en el desarrollo del modelo desarrollado en el presente capítulo?. Escriba el mismo en forma genérica.

P2) Qué debe modificarse para contemplar el caso de un separador líquido-líquido?. Escriba el modelo correspondiente.

P3) Cómo puede modelar distintos tipos de condensadores y hervidores?. Qué es lo que debe tener en cuenta en esta oportunidad a diferencia del análisis realizado en el Capítulo X ?

P5) Puede contemplar en el modelo distintos tipos de controladores además de los clásicos P, PI o PID?. Qué debe conocer y qué debe modificar en el modelo propuesto en ese caso?.

P6) Qué sucede si pretendemos un modelo que involucre varias columnas inter-conectadas según un esquema dado por el usuario?. Bosqueje algunas ideas sobre el armado del modelo, y los principales factores estructurales a tener en cuenta. Cómo afecta esta situación en el método numérico adecuado para la solución del sistema de ecuaciones diferenciales?.

P7) Confeccione un diagrama de flujos para un programa escrito en PASCAL, o FORTRAN, BASIC, C, etc., en el cual se ingresen los datos y se resuelvan las trayectorias temporales de una columna de destilación según el modelo discutido en este capítulo. Suponga que dispone de las subrtuinas para estimación de propiedades fisicoquímicas y para la resolución de métodos numéricos según lo necesite.

P8) Cómo relajaría la hipótesis que asume al sistema como adiabático, esto es sin

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

posibilidades de simular el intercambio calórico a través de las paredes?. Qué datos necesitaría incorporar y cómo se modifica el sistema de ecuaciones diferenciales?. Dificulta esto la resolución del miembro derecho del sistema?. Proponga una estrategia de resolución.

P9) Suponga que estamos simulando una situación de falla en una columna operando a una presión muy elevada. Se tiene como dato que a una determinada presión se activa la válvula de alivio y el caudal de salida de gas es dado por una expresión que es función de la diferencia de presiones entre la columna y la atmosférica. Cómo modifica el modelo (si es que hay que hacerlo) para simular esta situación?. Cuál de las hipótesis asumidas en nuestro modelo es la más restrictiva para este caso?.

CAPÍTULO XVI

INTRODUCCIÓN AL CONTROL DE PROCESOS. SISTEMAS DE CONTROL TÍPICOS Y UTILIDAD DE LOS SIMULADORES DINÁMICOS

Por
Jorge R. Vega y Nicolás J. Scenna

XVI.1. INTRODUCCIÓN

Ya se mencionó en capítulos anteriores que la operación de un proceso involucra la necesidad de satisfacer una serie de aspectos de carácter técnico, económico y social. En efecto, el objetivo de todo proceso es obtener un determinado producto (o un conjunto de productos), con características de calidad preespecificadas, con la mayor rentabilidad posible, y sin generar alteraciones perjudiciales para el medio ambiente y/o las personas, por lo que deben perseguirse varios objetivos simultáneamente. En este capítulo, nos limitaremos a considerar exclusivamente algunos de los aspectos técnicos, en particular los relacionados con el control de procesos.

En el área del control de procesos es muy amplia la bibliografía existente. Entre los libros específicos más tradicionales podemos citar: Ray (1981) y Stephanopoulos (1984). Del punto de vista del modelado matemático y de la teoría de control, es indudable que todo proceso tiene un comportamiento no lineal. Sin embargo, en el caso de los procesos continuos, es usual recurrir a la linealización del modelo en la cercanía de sus puntos de operación típicos, y la posterior aplicación de conceptos de la teoría del control lineal. En esta última área, es prácticamente innumerable la bibliografía disponible; entre los libros más conocidos podemos mencionar: Ogata (1970); Takahashi y col. (1977); Kuo (1996); etc. Otros libros más recientes tratan temas de control lineal con una variedad de ejemplos resueltos en base a "softwares" muy conocidos: Bishop (1993); Kuo y Hanselman (1994).

En las últimas décadas, y debido fundamentalmente al gran avance de la tecnología digital y de las ciencias de la computación, junto con las mayores exigencias del mercado en cuanto a la calidad de los productos finales, los conceptos teóricos asociados al control de procesos, el "hardware", el "software", y las aplicaciones académicas y/o industriales, han experimentado una notable evolución. Hoy en día, "saber" control de procesos involucra una masa de conocimientos tan grande que es prácticamente imposible hablar de especialistas en este área. Para

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

enfatizar la idea -y a mero título de ejemplo-, enumeremos simplemente algunos de los temas más frecuentemente encontrados en la literatura y relacionados sólamente con los conceptos teóricos asociados al control de procesos: modelado matemático; modelos continuos o discretos, determinísticos o estocásticos; simulación dinámica; identificación; control óptimo; control adaptable; control robusto; estimación de estados y parámetros; control no lineal; medición; adquisición y tratamiento de datos; detección y diagnosis de fallas; análisis de señales y filtrado óptimo; control por computadora, control distribuido; control supervisor, control estadístico; etc., etc.

En la Tabla 1, se muestra esquemáticamente una clasificación muy general de los sistemas de control de procesos. Los niveles inferiores corresponden a los sistemas más simples y menos automatizados. El control manual surgió simultáneamente con los primeros procesos industriales, con un papel preponderante por parte del operador, encargado usualmente del accionamiento manual de los dispositivos de control (por ej., apertura y cierre de válvulas; mediciones "fuera de línea" de variables del proceso; etc.). El segundo nivel tuvo su auge con el desarrollo de la tecnología digital, los sensores "en línea", las comunicaciones digitales, etc. La aparición de los PLC (a comienzos de la década del 70), permitió la implementación de los primeros controladores digitales con efectos combinados (proporcional + integral + derivativo). El desarrollo de las comunicaciones, de mejores interfaces (gráficas) con el usuario, y de pequeños sistemas de cómputo (PCs), junto a la paulatina reducción de sus costos, posibilitaron implementar algoritmos de control avanzado, sistemas de control distribuido (DCS) y de control supervisor (SCADA). Mayores detalles sobre estos tipos de sistemas pueden consultarse por ejemplo en Amy (1992).

Con el advenimiento de sistemas de cómputo cada vez más potentes y con mayor capacidad de soporte de datos, se posibilitó la operación del proceso (o de la planta) en forma interrelacionada con información proveniente de sectores diversos de la empresa, permitiendo integrar datos provenientes de los sectores de producción, administrativo, de mantenimiento, de ventas, etc. Así, la decisión sobre la operación de toda la empresa (incluido el proceso específico) puede ser comandada directamente desde los niveles gerenciales. Más aun, las decisiones pueden ser tomadas no sólo ya por una empresa aislada, sino por un conjunto de empresas con un interés o una política productiva común. Por último, la automatización total prevista en el nivel V, prácticamente no existe hoy en día (excepto posiblemente para aplicaciones o emprendimientos de poca envergadura, y relativamente aislados de otros emprendimientos). Sin embargo, la tendencia es alcanzar este máximo grado de automatización.

TABLA XVI.1. Clasificación de los sistemas de control de procesos

Nivel	Nombre	Tipos de control y principales características (*)
V	Automatiza-ción total	Sistemas informáticos integrados - Mínima intervención humana - Control y decisión a cargo del sistema -
IV	Jerárquico (gerencial)	Sistemas de control avanzado - Bases de datos - Reconciliación de datos - SPC - Políticas de producción - Relación con factores económicos/financieros - Sistemas de cómputo potente ("mainframe") - Sistemas expertos y de inteligencia artificial - CIM -
III	Avanzado	DCS - Interfaces gráficas - Interfaces hombre/máquina - Control por computadora - Algoritmos de control (por realimentación de estados, óptimo, adaptable, no lineal, diagnosis de fallas, etc.) - SCADA - Comunicaciones digitales por radio y telefónicas -
II	Clásico	Mediciones "en línea" - Comunicaciones analógicas y digitales - Control automático a lazo cerrado - Simulación dinámica - Controladores PID- Dispositivos digitales - PLC - Interfaces digitales ("displays") -
I	Manual	Órganos de accionamiento manual - Ausencia de mediciones "en línea" - Interfaces con el operador inexistentes o inadecuadas - Dispositivos analógicos -

(*) Siglas: PLC: controlador de lógica programable; DCS: sistema de control distribuido; SCADA: adquisición de datos y control supervisor; SPC: control estadístico de procesos; CIM: producción informatizada integralmente.

En el resto de este capítulo, nos ocuparemos básicamente de aspectos relacionados con el control clásico y el avanzado (niveles II y III), enfatizando la utilidad de la simulación numérica en relación con el control de procesos. En la primer parte, se incluye una revisión breve de conceptos y estructuras básicas de los sistemas de control, y una somera descripción cualitativa sobre su funcionamiento. Si bien varios de los temas que se tratan son objeto de materias de grado específicas, se los incluye para considerar enfoques más modernos que son de uso cada vez más frecuente en la actividad profesional. Tal es el caso de la descripción de sistemas en variables de estado, el control de sistemas no lineales, el control por realimentación de estados, el control óptimo, el control adaptable, etc.

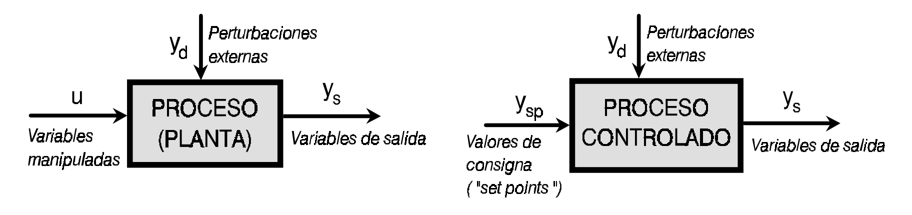
En la segunda parte del capítulo, se abordan específicamente aspectos sobre la simulación numérica de estos sistemas, y su utilidad en la práctica ingenieril. Se tratan temas como el uso de simuladores para el diseño de sistemas de control, y para el ajuste de los parámetros de los controladores. Si bien no se hace referencia a simuladores específicos, los ejemplos presentados pueden hoy en día ser resueltos con la mayoría de los simuladores comerciales disponibles. Es indudable que el uso de

simuladores dinámicos presenta una gran ventaja del punto de vista del análisis de los sistemas de control. La gran potencia de cómputo disponible actualmente permite la simulación de sistemas más complejos, con modelos matemáticos más detallados, y con una mejor aproximación al comportamiento real de las plantas.

XVI.2. NOCIONES BÁSICAS SOBRE CONTROL DE PROCESOS

Introduciremos primero algunas definiciones básicas relacionadas con los temas a tratar en el resto del capítulo. Un *proceso* es un conjunto de operaciones -simultáneas o secuenciales- que producen transformaciones de la materia de carácter físico y/o químico. Todo proceso interactúa con el resto del medio a través de las variables de salida, de las variables manipuladas, y de las perturbaciones. (Nótese que estamos ahora hablando de 'proceso' en una forma mucho más restringida que la considerada en la Introducción, y con un lenguaje diferente del utilizado en el Capítulo II). Las *variables de salida* son aquellas variables del proceso cuyo valor se desea o se necesita conocer a lo largo del tiempo (normalmente son las indicativas de la calidad del producto, del nivel de producción, etc.). Las *variables manipuladas* son aquellas que pueden ser modificadas durante la operación del proceso, para que las variables de salida evolucionen según una política preestablecida (por ejemplo, una variable manipulada típica es el caudal de alimentación de un reactivo en un proceso químico, que puede modificarse actuando sobre el grado de apertura de una válvula). Por último, todo proceso está sometido a *perturbaciones* (normalmente indeseables), como por ejemplo pérdidas energéticas al medio ambiente, presencia de impurezas indeseadas en los reactivos, etc. En general, las perturbaciones son variantes en el tiempo, e interesa conocerlas para tomar acciones sobre el proceso que permitan atenuar los efectos indeseados que ellas causan. La Figura 1.a) muestra un esquema global de un proceso no controlado, usualmente denominado la 'planta'.

Un proceso es (automáticamente) controlado cuando existen componentes operativos (los controladores) que permiten recibir valores deseados de consigna (o "set points"), de manera tal que las variables de salida evolucionen automáticamente hacia esos valores especificados, aun en presencia de perturbaciones externas. Un esquema en bloques de un proceso controlado se indica en la Figura 1.b).



a) Proceso no controlado **b) Proceso controlado**

Figura XVI.1: Esquemas globales de procesos no controlados y controlados.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Hoy en día, es prácticamente inadmisible pensar en la existencia de procesos que pudieran operar en forma no controlada. Por el contrario, es deseable disponer de *sistemas de control* cada vez más elaborados que permitan un alto grado de automatización del proceso, y que aseguren la obtención de productos finales con características de calidad ubicadas en un rango de especificación predeterminado. Por tal motivo, en el resto de este capítulo nos centraremos en el estudio de algunas configuraciones típicas de sistemas controlados.

XVI.2.1. Modelado matemático

El diseño de estrategias de control clásico y avanzado requiere normalmente de desarrollos teóricos y de simulaciones dinámicas, que deben basarse en un modelo matemático del proceso a controlar. Dicho modelo debe representar -con cierto grado de aproximación- el comportamiento dinámico de las principales variables de interés. Como la gran mayoría de los procesos reales poseen características no lineales, entonces su representación natural se efectúa mediante un modelo matemático que involucra normalmente un conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales. Cuando el sistema físico o el proceso a modelar se puede considerar de *parámetros concentrados*, entonces el modelo matemático resultante incluye ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO); mientras que si el proceso es de *parámetros distribuidos*, el modelo matemático incluirá ecuaciones diferenciales parciales. En este capítulo trataremos exclusivamente con sistemas de parámetros concentrados. Desarrollos relativos al control de sistemas de parámetros distribuidos pueden consultarse por ejemplo en Ray y Lainiotis (1978).

Típicamente, los modelos matemáticos surgen al plantear -para cada subsistema del proceso- los balances tradicionales de materia, de cantidad de movimiento y de energía. Los modelos que representan con mejor aproximación el funcionamiento real de una planta, se suelen denominar *modelos detallados* (MD). Los MD involucran por lo general estructuras matemáticas con un gran número de ecuaciones (algebraicas y diferenciales), usualmente no lineales y acopladas; y permiten simular la dinámica de la mayor parte de las variables de interés intervinientes en el proceso. En la mayoría de las aplicaciones es imposible disponer de un MD del proceso; ya sea por limitaciones teóricas para su deducción, por imposibilidades de índole práctica para considerar todas las variables intervinientes, por desconocimiento fenomenológico de algunas etapas del proceso, etc.

Por lo general, encarar diseños de control basados en un MD del proceso suele resultar extremadamente dificultoso, debido a su complejidad matemática. Por tal motivo, es usual desarrollar modelos relativamente sencillos (o recurrir a diversos niveles de simplificación del MD si se lo dispusiera), de manera de contar con un modelo simplificado o *modelo de tendencia* (MT) del proceso, útil para propósitos de control. El MT deberá predecir con suficiente exactitud aquellas variables

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

específicamente intervinientes en los lazos de control, tales como las variables manipuladas y medidas.

Clasificación de los modelos matemáticos

Una clasificación usual de los modelos se basa en el número de variables involucradas en la planta. En general, en todo proceso existe un gran número de variables manipuladas (o de entrada) y de salida, en cuyo caso el modelo correspondiente se denomina de *múltiples entradas* y de *múltiples salidas* (MIMO). En el caso de algunos procesos sencillos, el modelo matemático puede incluir una única variable manipulada y una única variable de salida, y entonces el modelo se denomina de *una entrada* y *una salida* (SISO). Los casos combinados se denominan MISO y SIMO.

Desde el punto de vista de la descripción temporal de las variables intervinientes, los modelos se clasifican en *continuos* y *discretos*. Un modelo matemático (dinámico) continuo involucra la resolución de ecuaciones *diferenciales*; un modelo matemático (dinámico) discreto involucra la resolución de ecuaciones *en diferencias.* Esta clasificación puede muchas veces dar lugar a confusiones. Por ejemplo, una reacción química desarrollada en un intervalo de tiempo finito es un proceso continuo, y que usualmente se representa a través de un modelo continuo; sin embargo, su implementación y resolución computacional será siempre discreta. Algunas veces, un mismo proceso puede incluir características combinadas. Por ejemplo, si en la reacción química continua antes mencionada se efectúan mediciones de la conversión a intervalos de dos minutos, entonces el proceso de medición tiene características discretas. Un modelo matemático adecuado para tal proceso combinado deberá contemplar las características continuas de la reacción y las discretas de la medición. Pero, si las constantes de tiempo características de la reacción química fuesen mucho mayores que los intervalos correspondientes a la medición, podría modelarse el proceso completo como un sistema continuo. Sin embargo, la implementación computacional final siempre tendrá atributos discretos.

Por último, los modelos matemáticos pueden ser *determinísticos* o *estocásticos*. Un modelo matemático es determinístico cuando asume nulos los ruidos típicos del proceso y de la medición; en tal caso, las evoluciones temporales de todas las variables del modelo pueden ser determinadas en forma precisa. En cambio, en un modelo estocástico las componentes aleatorias propias del proceso y de la medición se asumen de estadística conocida y usualmente se las considera como “ruidos blancos”.

En el resto de este capítulo consideraremos sólo modelos continuos y determinísticos; y retomaremos los planteos discretos y estocásticos en el Capítulo XX.

Representación de modelos matemáticos en variables de estado

Las técnicas modernas de control utilizan cada vez con mayor frecuencia la descripción de los procesos en *variables de estado*. Un *modelo de estados*, determinístico y continuo se representa a través del siguiente sistema de ecuaciones:

Ecuación de estado: $$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x},\mathbf{u},t) \quad ; \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \qquad (1.a)$$

Ecuación de salida: $$\mathbf{y} = \mathbf{h}(\mathbf{x}) \qquad (1.b)$$

donde t es el tiempo; $\mathbf{x}$ (n×1) es el vector de las variables de estado; $\mathbf{x_0}$ (n×1) es el vector de las condiciones iniciales; $\mathbf{y}$ (p×1) es el vector de las variables de salida; $\mathbf{u}$ (m×1) es el vector de las variables de control (o manipuladas); y $\mathbf{f}$ y $\mathbf{h}$ son vectores de funciones no lineales.

La descripción de los procesos en variables de estado surge naturalmente, como consecuencia de las ecuaciones de balance del sistema a modelar. Normalmente, se asume que los estados de un sistema son aquellas variables cuya evolución se representa a través de una ecuación diferencial. Por ejemplo, supongamos un sistema sencillo conformado por un tanque de sección transversal uniforme (A), alimentado con un caudal variable de agua, $q_1(t)$. Admitamos que el caudal de salida, $q_2(t)$, depende de la altura de agua dentro del tanque y de la "resistencia" hidráulica (R) de la salida. Supongamos que se desea conocer la evolución temporal de la altura de agua dentro del tanque, $h(t)$. La ecuación de balance de materia es:

$$A\, dh(t)/dt = q_1(t) - q_2(h,R,t) \quad ; h(0) = h_0 \qquad (2)$$

donde h_0 es la altura de agua dentro del tanque, a t=0. Este sistema tiene entonces un único estado x=h; y una sola variable manipulada u=q_1. El modelo de estados para este sistema (SISO, determinístico y continuo), es:

$$dx(t)/dt = - q_2(x,R,t)/A + u(t)/A \quad ; x(0) = x_0 \qquad (3.a)$$

$$y = x \qquad (3.b)$$

El modelo matemático de las ecns. (1) involucra en general relaciones no lineales entre las variables de estado, de salida y de control. A efectos del control, tradicionalmente se ha recurrido a la linealización de los modelos no lineales en los puntos de operación del proceso (básicamente, la linealización consiste en una expansión en serie de Taylor alrededor de los puntos de equilibrio). La versión linealizada del sistema de la ecn. (1) resulta:

Ecuación de estado: $$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{B}\,\mathbf{u} \quad ; \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \qquad (4.a)$$

Ecuación de salida: $$\mathbf{y} = \mathbf{C}\,\mathbf{x} \qquad (4.b)$$

donde $\mathbf{A}$ (n×n), $\mathbf{B}$ (n×m) y $\mathbf{C}$ (p×n) son matrices variantes en el tiempo.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

XVI.2.2. Estructuras utilizadas en control clásico

A continuación se resumen algunas de las configuraciones típicas más frecuentemente utilizadas en control clásico de procesos. Los temas que se tratan pretenden ser una revisión de conceptos previamente adquiridos por el lector.

Control a lazo abierto y a lazo cerrado

En la Figura 2 se esquematiza un sistema de control a *lazo abierto*, que se identifica fácilmente por la ausencia de realimentaciones. En base a los valores de consigna ($\mathbf{y}_{sp}$), el controlador actúa modificando las variables manipuladas (**u**) del proceso de manera tal que las variables de salida ($\mathbf{y}_s$) alcancen los valores preespecificados. Los sistemas de control a lazo abierto son normalmente simples y económicos, pero como contrapartida con ellos no se pueden asegurar valores de $\mathbf{y}_s$ exactamente iguales a los especificados por $\mathbf{y}_{sp}$. En efecto, cualquier apartamiento de $\mathbf{y}_s$ con respecto a $\mathbf{y}_{sp}$, no podrá ser detectado por el sistema, y en consecuencia no se podrá corregir **u** para compensar el error.

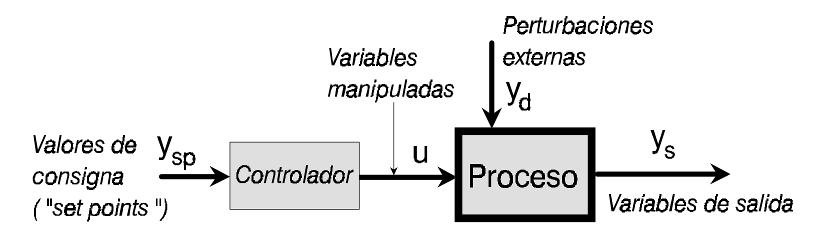


Figura XVI.2: Sistema de control a lazo abierto.

Los sistemas de control a *lazo cerrado* (también denominados sistemas de control realimentados), permiten corregir las deficiencias propias de los sistemas de lazo abierto. En la Figura 3, se representa en forma esquemática un sistema de control a lazo cerrado por realimentación de la salida. En este esquema se han separado las variables de salida, clasificándolas en medibles y no medibles. Una variable de proceso es *medible* cuando existen sensores (*medidores*) que posibilitan determinar directamente su magnitud (por ejemplo, la temperatura puede determinarse directamente con una termocupla o una termoresistencia; la presión con un manómetro, etc.). Una variable de proceso es *no medible* si no existe un sensor con las características antes mencionadas.

Para propósitos de control, interesa disponer de mediciones “en línea”, sin retardos y con la mayor precisión posible; pero disponer de una medición con estas características puede requerir de sensores tan costosos que no se justifique su instalación. En tales casos, las variables no medibles pueden ser *estimadas* en forma indirecta, a partir de otras mediciones (por ejemplo, la concentración de un compuesto disuelto en un medio acuoso podría ser estimada a partir de mediciones de la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

diferencia entre el índice de refracción de la solución y del medio, y de una calibración del detector). La estimación de variables no medibles será tratada en el Capítulo XX.

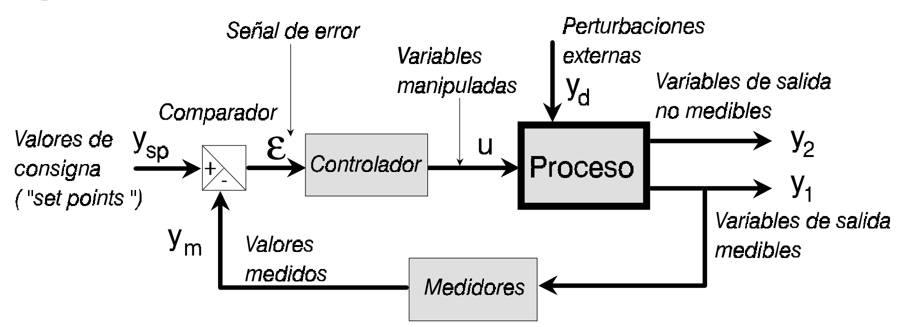


Figura XVI.3: Sistema de control a lazo cerrado por realimentación de la salida.

En un sistema de control a lazo cerrado, los valores medidos ($\mathbf{y}_m$) se comparan con los de consigna, generándose una señal de error (ε). En base a dicha señal de error, el controlador modifica la variable manipulada de manera tal que las salidas medibles del proceso ($\mathbf{y}_1$) evolucionen hacia los valores de las consignas.

En la Figura 3, el bloque controlador es una relación matemática $\mathbf{u}=\mathbf{f}(\varepsilon)$ que permite establecer las acciones de control a efectuar en función de las señales de error. Debe notarse que si bien se indican por separado los bloques comparador y controlador, en la práctica un controlador incluye siempre al comparador. Un controlador puede ser un equipo electrónico específico (“hardware”) ubicado en un “rack”, que recibe señales de las mediciones, y que se conecta con un órgano de acción final (por ej., una válvula) por medio de algún sistema de comunicación. Alternativamente, un controlador puede implementarse a través de un algoritmo computacional (éste es el caso del control por computadora). Desde el punto de vista del control, el problema de diseño reside en: a) determinar la estructura del controlador a utilizar (por ej., si se requiere de un controlador no lineal, o de uno lineal con efectos proporcional, integral, etc.); y b) ajustar los parámetros del controlador elegido (sintonizar el controlador).

Sistema combinado de control en avance y realimentación de salida

Los sistemas de control realimentados presentan algunas deficiencias conocidas, como por ejemplo: a) pueden generar inestabilidad en las respuestas a lazo cerrado; b) no son eficientes en procesos caracterizados por dinámicas lentas, o con elevados “tiempos muertos” (es decir, cuando el efecto de las variables de entrada se observa en las salidas con cierto retardo); c) ante perturbaciones, responden después de ocurridos los efectos indeseados que aquellas provocan. Los sistemas de control *en*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

avance permiten -al menos parcialmente- corregir esas deficiencias. Pero para ello, es necesario poder medir las perturbaciones, y conocer con precisión el modelo del proceso.

En la Figura 4 se muestra un proceso controlado por un sistema de lazo cerrado combinado. La variable manipulada (**u**) es la combinación de un control por realimentación de salida (“feedback”, $\mathbf{u_1}$), más una componente de control en avance (“feedforward”, $\mathbf{u_2}$). Las características de los controladores están representadas por $\mathbf{K_1}$ y $\mathbf{K_2}$. Las perturbaciones del proceso se clasificaron en medibles ($\mathbf{y_{d1}}$) y no medibles ($\mathbf{y_{d2}}$), según criterios similares a los ya mencionados para las variables de salida. El control en avance presenta la ventaja de permitir tomar acciones anticipadas, que posibilitan compensar los efectos indeseados causados por las perturbaciones medibles. Las desviaciones remanentes en las variables de salida son compensadas por el lazo cerrado de realimentación.

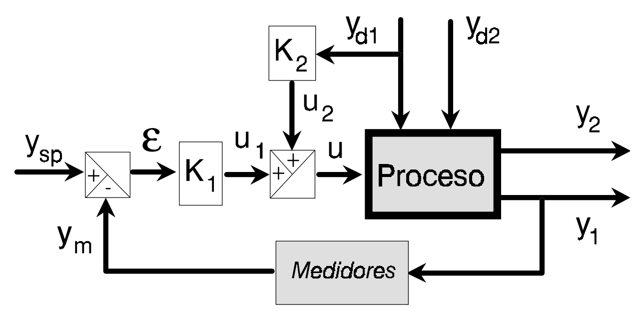


Figura XVI.4: Sistema combinado de control en avance y realimentación de la salida.

A manera de ejemplo, consideremos un proceso consistente en una reacción llevada a cabo en un tren de reactores tanque agitados continuos conectados “en cascada” (es decir, la entrada a cada reactor proviene de la salida del anterior), y donde los reactivos se alimentan exclusivamente al primer reactor del tren. Supongamos que alguno de esos reactivos tenga un nivel variable de impurezas que puedan por ejemplo desactivar la reacción. El producto final (obtenido en el último reactor del tren) sólo se verá afectado por el nivel creciente de impurezas después de transcurrido un tiempo relativamente elevado (del orden del tiempo de residencia medio de todo el tren); por lo que si sólo se efectúan mediciones sobre el producto final, cuando se detecte la presencia de impurezas en el último reactor entonces ya todo el tren estará contaminado. Una forma de evitar este problema es implementar un lazo de control en avance, con mediciones del nivel de impurezas en los reactivos. Detectados niveles elevados de las mismas podrán efectuarse inmediatamente acciones de control tendientes a compensar los efectos indeseados (por ejemplo, adicionar algún reactivo que consuma las impurezas o las neutralice).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

XVI.2.3. Ajuste de los Controladores Clásicos

En los sistemas de control, el controlador es el componente activo que recibe las señales de "set point" y las mediciones, y efectúa acciones de control para ajustar los valores de las variables manipuladas. Internamente, en un controlador puede implementarse una ley de control muy sencilla (por ejemplo, sólo un efecto proporcional), o relativamente más compleja, como en el caso de los controladores no lineales con realimentación de estados, que veremos más adelante. Aunque actualmente es posible implementar algoritmos de control sofisticados, todavía un gran número de controladores utilizados en la industria son lineales con acciones proporcional, integral y derivativa (PID). En un controlador PID, la variable manipulada se relaciona con la señal de error a través de:

Controlador lineal con acciones P+I+D

$$u(T) = K_p \varepsilon + \frac{K_p}{T_I} \int_0^t \varepsilon \, dt + K_p T_D \frac{d\varepsilon}{dt} + c(t) \qquad (5)$$

donde K_p, T_I, y T_D son las constantes proporcional, integral y derivativa, respectivamente; y $c(t)$ es la señal del controlador cuando ε=0. Las constantes K_p, T_I, y T_D son los parámetros de ajuste del controlador.

En los cursos de grado de control lineal, el ajuste de los parámetros de un controlador se efectúa teniendo en cuenta criterios de estabilidad del sistema operando en lazo cerrado, y caracerísticas preestablecidas para la evolución temporal de la respuesta, tales como el grado de amortiguamiento, el máximo sobrepaso, etc. (ver por ejemplo Kuo, 1996). Si bien los controladores PID son estructuralmente adecuados para sistemas lineales, también es aceptable su 'performance' en muchos sistemas no lineales (como lo son la mayor parte de los procesos químicos), al menos dentro de ciertos rangos operativos. En la práctica, algunas veces suele utilizarse sólo control proporcional, o proporcional más integral. En tales casos, valores típicos de las constantes de ajuste son:

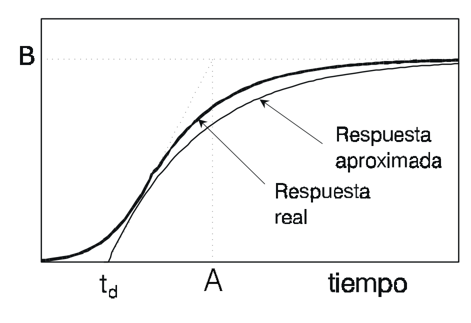
Control P $1 < PB < 500$ (PB = banda proporcional = $100/K_p$)

Control P+I 0,1 min < TI < 50 min.

Uno de los procedimientos empíricos más tradicionales utilizados para ajustar las constantes de un controlador PID, es el denominado *método de la curva de reacción del proceso*, también conocido como el método de Cohen y Coon. Básicamente, el procedimiento de ajuste parte de obtener la respuesta *temporal* del proceso a lazo abierto (y_m), cuando se efectúa un cambio escalón de magnitud A en la variable accionada (u). La curva de respuesta de un gran número de procesos es de forma sigmodea, y puede ser aproximada por un sistema de primer orden más un tiempo muerto, que representado en el plano de Laplace resulta:

$$\frac{y_m}{u} \cong \frac{K exp(-t_d s)}{\tau s + 1} \qquad (6)$$

donde K es la ganancia estática; t_d es el tiempo muerto; y τ es la constante de tiempo. En la Figura 5, se muestra una curva de reacción típica, la aproximación a través del sistema de primer orden más retardo, y la evaluación de los tres parámetros de la ecn. (6).



$K = B / A$

$\tau = B / P$ (P es la pendiente de la recta tangente a la curva de respuesta real, en el punto de inflexión).

t_d = tiempo muerto

Figura XVI.5: Método de la curva de reacción (Cohen y Coon) para ajustar los parámetros de un controlador.

El ajuste de los parámetros del controlador depende del tipo de controlador utilizado. En la Tabla 2, se resumen las recomendaciones dadas por Cohen y Coon. Mayores detalles sobre este método de ajuste y sobre otros métodos tradicionales (por ejemplo, el método de Ziegler-Nichols basado en el análisis de la respuesta *frecuencial* del proceso), pueden ser consultados en Stephanopoulos (1984).

Obviamente, los parámetros resultantes de la aplicación de este o de otros métodos de ajuste, conforman sólo una primera aproximación de los ajustes definitivos, que deberán ser posteriormente efectuados para cumplir con las especificaciones de control deseadas. El ajuste "fino" definitivo de los parámetros probablemente deberá efectuarse en la misma planta en funcionamiento.

TABLA XVI.2. Ajuste de parámetros de un controlador (cohen y coon)

P	**P+I**	**P+I+D**
$K_p = \frac{1}{K}\frac{\tau}{t_d}\left(1 + \frac{t_d}{3\tau}\right)$	$K_p = \frac{1}{K}\frac{\tau}{t_d}\left(0{,}9 + \frac{t_d}{12\tau}\right)$	$K_p = \frac{1}{K}\frac{\tau}{t_d}\left(\frac{4}{3} + \frac{t_d}{4\tau}\right)$
	$T_I = t_d \frac{30 + 3t_d/\tau}{9 + 20t_d/\tau}$	$T_I = t_d \frac{32 + 6t_d/\tau}{13 + 8t_d/\tau}$
		$T_D = t_d \frac{4}{11 + 2t_d/\tau}$

Ejemplo: Consideremos el problema final del Capítulo XIV (Figura 7), que posee tres tanques interconectados en cascada. Supongamos que deseamos regular la altura de agua a la salida (tanque tres) en 1,2 m, manipulando el caudal de entrada de agua al sistema (E_1). Para ello, se propone reemplazar la válvula de entrada de agua al sistema por una válvula de control, en la que se acciona su apertura (p). En la Figura 6, se muestran los resultados de simulación, cuando se utiliza un controlador con efecto proporcional P (línea delgada), y con efecto proporcional más integral P+I (línea gruesa). Los parámetros del problema son los mismos del ejemplo del Capítulo XIV, con excepción de C_{v1} f=2 10^{-3} $m^4/(min\ Kg^{1/2})$. Las constantes de ajuste del controlador fueron: 1) K_p=5, para el control P; y 2) K_p=5, T_I=50, para el control P+I.

p: apertura de la válvula; $0<p<1$.

h_3: nivel de agua en el tanque de salida [m].

E_1: caudal de entrada de agua al sistema [m^3/min.].

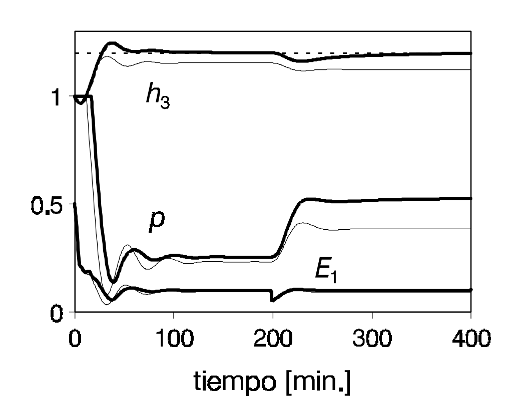


Figura XVI.6: Regulación de h_3 por manipulación del caudal de entrada E_1.

En la simulación se supuso que el nivel inicial del agua en el tanque tres era de 1 m. Además, a t=200 min. se simuló una caída brusca de la presión de entrada (P_e) de 8 atm. a 5 atm. Nótese que h_3 no alcanza el nivel deseado de 1,2 m cuando se utiliza sólo efecto P; mientras que evoluciona correctamente al incluirse el efecto integral. Esto es razonable, dado que el sistema completo se comporta aproximadamente como un sistema de tercer orden, y entonces con sólo efecto P queda un “off set” permanente. Para t>200 min., se requiere una mayor apertura de la válvula dado que P_e es menor.

XVI.3. NOCIONES BÁSICAS SOBRE ALGORITMOS DE CONTROL AVANZADO

En la práctica, el diseño de algoritmos de control avanzado (como los enumerados en el nivel III de la Tabla 1., involucra: 1) un análisis del proceso para determinar la estructura de control a utilizar; 2) el diseño de la “ley de control” (controlador); 3) el ajuste de los parámetros intervinientes; y 4) la evaluación del sistema de control resultante. Con referencia a 1), deberá establecerse el tipo de

algoritmo de control a utilizar: no lineal, adaptable, de realimentación de estados, de control en avance y/o realimentación, etc. También será necesario especificar las características de las mediciones y de las variables a manipular, las perturbaciones previstas en el proceso, etc. Usualmente, este primer punto se resuelve en base a la experiencia profesional y al conocimiento "a priori" del proceso; y es posiblemente la etapa más crítica, porque sustenta los desarrollos posteriores a efectuar.

Para diseñar la "ley de control" -es decir, cómo manipular las variables del proceso para conseguir los objetivos deseados-, se utilizan conceptos teóricos de optimización y control aplicados sobre el modelo matemático disponible. Este punto, requiere usualmente de desarrollos analíticos teóricos, que se tornan más tediosos cuanto más complejo sea el modelo matemático utilizado.

Por último, los puntos 3) y 4) se desarrollan en forma simultánea. El ajuste de los parámetros asociados a la ley de control se efectúa mediante la simulación numérica del proceso (representado éste por el modelo matemático más detallado disponible), en el cual deben incluirse los nuevos bloques de control propuestos. Los parámetros resultantes deberán satisfacer la "performance" deseada en las dinámicas de las variables del proceso, conseguir los objetivos de control preespecificados, satisfacer los requerimientos de estabilidad y de robustez, etc.

En definitiva, el diseño de sistemas de control avanzado requiere del conocimiento de un modelo matemático del proceso. Si se dispusiera de un modelo matemático *exacto* -es decir, que permitiera predecir las evoluciones temporales de todas las variables del proceso con total exactitud-, se podría entonces (al menos teóricamente) determinar una política de control óptima, que asegurara conseguir los objetivos de control deseados (por ejemplo, mejorar la calidad del producto final, minimizar los costos de producción, maximizar la productividad, etc.). Obviamente, en la práctica los modelos exactos no existen, y el modelo más aproximado disponible (un MD) debería ser utilizado para encarar los diseños. Sin embargo, muchas veces los algoritmos derivados a partir de MDs resultan extremadamente complejos, ya sea en su desarrollo y/o en su implementación. En tales casos, es usual recurrir a modelos simplificados (un MT) para poder obtener algoritmos de control razonablemente implementables del punto de vista práctico. Claramente, cuando el diseño de las estrategias de control se basa en estos modelos simplificados, entonces la solución obtenida resulta subóptima.

En la Figura 7, se muestra un esquema general de un proceso con control avanzado, que sirve además como base para la implementación computacional del sistema en vistas al diseño y ajuste de los algoritmos de control. El bloque correspondiente a los medidores engloba a los sensores, transductores, líneas de comunicación, etc.; y será tratado con más detalle en el Capítulo XX. Con respecto a la "ley de control", adelantemos que en general involucra una realimentación de los estados estimados ($\hat{x}$), de los parámetros ajustados (θ), y de las mediciones ($\mathbf{y}_m$), del tipo:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\mathbf{u} = \mathbf{f}(\mathbf{y}_{sp}, \ \mathbf{y}_m, \ \hat{\mathbf{x}}, \ \theta) \qquad (7)$$

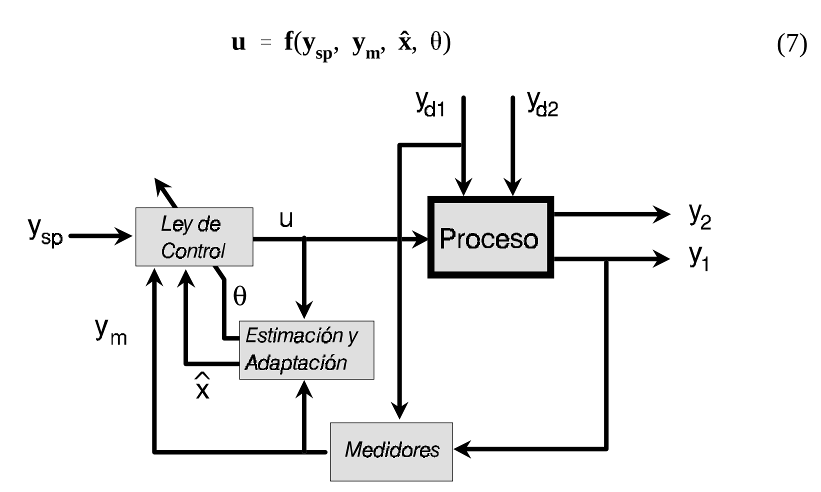


Figura XVI.7: Esquema general de un sistema de control avanzado.

La expresión anterior debe derivarse para cada caso en particular que se estudie, y depende del tipo de control a implementar (por ejemplo, en el caso del control óptimo, se obtiene en base a criterios de optimización dinámica, como se verá más adelante).

El bloque de estimación y adaptación "en línea" permite una doble función: 1) estimar aquellos estados del proceso que no son medibles; y 2) establecer modificaciones en los parámetros de la ley de control, que permitan mejorar la 'performance' del proceso. Este segundo punto se implementa exclusivamente en los algoritmos de control adaptable, y constituye un área específica del control que no será tratada en este capítulo (puede consultarse Landau, 1979).

Veamos a continuación, algunas estructuras específicas de control avanzado.

XVI.3.1. Control por realimentación de estados

Consideremos un proceso descripto a través de un modelo matemático lineal [ecns. (4)], correspondiente por ejemplo a un proceso linealizado. La técnica de control por realimentación de estados consiste en establecer una ley de control de la forma:

$$\mathbf{u} = - \mathbf{K} \ \mathbf{x} + \mathbf{u}_1 \qquad (8)$$

donde **K** es una matriz constante; y $\mathbf{u}_1$ representa una evolución temporal de referencia del control **u**. Reemplazando la ecn. (8) en la ecn. (4.a), resulta:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$d\mathbf{x}(t)/dt = (\mathbf{A} - \mathbf{B}\,\mathbf{K})\,\mathbf{x}(t) + \mathbf{B}\,\mathbf{u}_1(t)\ ; \quad \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \qquad (9)$$

En la Figura 8, se presenta un esquema en bloques de un sistema de control por realimentación de estados. El objetivo de los sistemas de control con realimentación de los estados es seleccionar la matriz de realimentación **K** de manera tal que los estados del proceso evolucionen según una dinámica deseada preestablecida. Recordemos que la dinámica asociada a la ecn. (9) queda determinada por los autovalores de la matriz **A-BK**; y entonces es posible plantear un problema de *diseño por ubicación de polos (o autovalores)*, consistente en: i) especificar la ubicación deseada de los autovalores en el plano complejo; y ii) calcular las componentes de **K** que den lugar a tales autovalores.

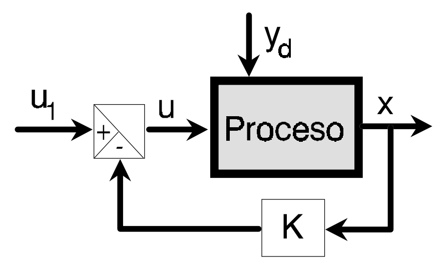


Figura XVI.8: Sistema de control por realimentación de estados.

Por último, debe notarse que en el sistema de control propuesto se asume que todos los estados del proceso son medibles. Esto no siempre es posible en un proceso real, y es entonces necesario recurrir a estimadores de estado u observadores, como se discutirá en el Capítulo XX. Al respecto, mencionemos dos resultados teóricos importantes. Una realimentación de estados de la forma de la ecn. (8): 1) no modifica la *controlabilidad* del sistema en lazo abierto; y 2) puede destruir la *observabilidad* del sistema en lazo abierto. Mayores detalles sobre las implicancias de estos resultados serán también tratados en el Capítulo XX, o pueden consultarse en Kuo (1996).

XVI.3.2. Control óptimo

Consideremos un proceso genérico representado por el siguiente modelo de estados:

$$d\mathbf{x}(t)/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t),\mathbf{u}(t))\ ;\ t_0 \leq t \leq t_f \qquad (10)$$

Supongamos que se pretende determinar el vector de control $\mathbf{u}(t)$ de manera tal que los estados del sistema evolucionen según trayectorias preespecificadas, entre los tiempos inicial y final. Para resolver la ecuación anterior es necesario establecer ciertas restricciones para el vector de estados **x**. Por ejemplo, si se fija la condición $\mathbf{x}(0)=\mathbf{x}_0$ estaremos tratando con un problema de valor inicial; si se establece $\mathbf{x}(t_f)=\mathbf{x}_f$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

será un problema de valor final; y si se adoptan ambas restricciones tendremos un problema de valores de frontera en dos puntos.

Un problema de *control óptimo* consiste en determinar el vector de control $\mathbf{u}(t)$, que permite minimizar (o en ciertos casos maximizar) un funcional de costo del tipo:

$$J = G\left[\mathbf{x}\left(t_f\right)\right] + \int_{t_0}^{t_f} F\left[\mathbf{x}(t), \mathbf{u}(t)\right] dt \qquad (11)$$

donde F y G son funciones arbitrarias (en general, no lineales). El primer término del funcional J penaliza los errores obtenidos a tiempo final, debido a que los estados puedan no alcanzar los valores especificados; y el segundo término penaliza tanto la historia de los errores en las trayectorias de los estados, como la potencia invertida en el control utilizado.

Por ejemplo, supongamos un reactor batch en el que se lleva a cabo una reacción exotérmica. Asumamos que: i) se pretende una conversión (c) con un valor final del 80%; ii) se manipula el caudal de refrigerante (u) para mantener constante la temperatura (T) de la reacción en 10ºC; y iii) la reacción se debe desarrollar en t_f=30 min. Entonces, un posible funcional a minimizar será:

$$J = \left[c(30) - 0{,}80\right]^2 + \int_0^{30} \left\{ k_1\left[T(t) - 10\right]^2 + k_2\, u^2 \right\} dt \qquad (12)$$

donde k_1 y k_2 son pesos relativos que contemplan el costo por error en la temperatura y el costo del control, respectivamente.

El área de control óptimo se encuentra muy desarrollada, tanto para sistemas lineales como no lineales. La profundidad de los conceptos involucrados en la misma excede los alcances de este capítulo, y por tal motivo se sugiere al interesado en incursionar por este área consultar libros específicos tales como Bryson y Ho (1975). En el resto de este punto nos limitaremos a estudiar una aplicación de control óptimo, conocida como la regulación lineal cuadrática.

El problema del regulador lineal cuadrático

El problema del regulador lineal cuadrático *determinístico* es uno de los problemas más típicos dentro de la teoría del control óptimo, y puede plantearse de la siguiente manera:

Dado un sistema dinámico lineal de la forma: $d\mathbf{x}/dt = \mathbf{A}\,\mathbf{x} + \mathbf{B}\,\mathbf{u}$; $\mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0$, $\mathbf{x}$ (n×1), $\mathbf{A}$ (n×n), $\mathbf{B}$ (n×m), *determinar el vector de control* $\mathbf{u}$ (m×1) *que permite controlar al sistema en el "set point"* $\mathbf{x}^d=\mathbf{0}$*, minimizando el siguiente índice de performance cuadrático:*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$J = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\left(t_f\right)\mathbf{S}_f\ \mathbf{x}\left(t_f\right) + \frac{1}{2}\int_{t_0}^{t_f}\left[\mathbf{x}^T(t)\,\mathbf{W}_x\,\mathbf{x}(t) + \mathbf{u}^T(t)\,\mathbf{W}_u\,\mathbf{u}(t)\right]dt \qquad (13)$$

donde $\mathbf{S}_f$ (n×n), $\mathbf{W}_x$ (n×n) *y* $\mathbf{W}_u$ (m×m) *son matrices de peso (definidas positivas).*

Nótese cómo en el funcional de la ecn. (13), la matriz $\mathbf{S}_f$ penaliza al sistema que no es capaz de alcanzar los estados deseados en el tiempo final, t_f; y las matrices $\mathbf{W}_x$ y $\mathbf{W}_u$ penalizan los errores en las evoluciones de los estados y los controles excesivos, respectivamente. Así, por ejemplo, valores relativamente bajos de $\mathbf{W}_x$ darán lugar a controles suaves, y los estados evolucionarán hacia el valor del equilibrio muy lentamente. Por el contrario, valores relativamente altos de $\mathbf{W}_x$ darán lugar a controles muy fuertes, y los estados alcanzarán muy rápidamente el equilibrio.

La “ley de control” que permite resolver el problema del regulador lineal cuadrático es una realimentación de los estados, similar a las ya descriptas en el punto XVI.3.1. (con $\mathbf{x}^{\mathbf{d}}=\mathbf{0}$), es decir:

$$\mathbf{u}(t) = -\,\mathbf{K}_1(t)\,\mathbf{x}(t) \qquad (14)$$

donde $\mathbf{K}_1$ es una matriz de realimentación que depende sólamente de los parámetros del sistema, y que se calcula como:

$$\mathbf{K}_1(t) = \mathbf{W}_u^{-1}\,\mathbf{B}^T\,\mathbf{S}(t) \qquad (15)$$

donde $\mathbf{S}(t)$ es la solución de la siguiente ecuación de Riccati (caracterizada por tener un término cuadrático en $\mathbf{S}$):

$$\mathrm{d}\mathbf{S}/\mathrm{d}t = -\,\mathbf{S}\,\mathbf{A} - \mathbf{A}^T\,\mathbf{S} + \mathbf{S}\,\mathbf{B}\,\mathbf{W}_u^{-1}\,\mathbf{B}^T\,\mathbf{S} - \mathbf{W}_x\,;\quad \mathbf{S}(t_f) = \mathbf{S}_f \qquad (16)$$

Nótese que la ecn. (16) es una ecuación diferencial ordinaria (EDO) matricial, y por lo tanto involucra a ‘n’ EDOs acopladas. Además, como sólo se conoce el valor de **S** a tiempo final, entonces la EDO debe resolverse integrando “hacia atrás” en el tiempo. Esta integración se resuelve normalmente definiendo una variable ‘falsa’ $t' = t_f - t$, e implementando la integración numérica con t' entre 0 y t_f. Para un sistema de parámetros constantes, y para tiempos muy elevados ($t \to \infty$), la solución de la ecn. (16) se obtiene a partir de la siguiente ecuación de Riccati algebraica:

$$-\,\mathbf{S}\,\mathbf{A} - \mathbf{A}^T\,\mathbf{S} + \mathbf{S}\,\mathbf{B}\,\mathbf{W}_u^{-1}\,\mathbf{B}^T\,\mathbf{S} - \mathbf{W}_x = \mathbf{0} \qquad (17)$$

En tal caso, $\mathbf{K}_1$ es también constante y la solución conduce a un sistema de control con un controlador proporcional de ganancia constante.

Ejemplo: consideremos un reactor tanque agitado continuo (RTAC) operado en forma isotérmica, donde se lleva a cabo una reacción química irreversible descripta por la siguiente cinética:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$A \xrightarrow{k_1} B \xrightarrow{k_2} C \qquad (18)$$

Definamos los siguientes parámetros adimensionales: $\tau=V/F$; $t=t'/\tau$; $D_1=k_1\,\tau$; $D_2=k_2\,\tau$; donde t' es el tiempo real; V es el volumen del reactor; τ es el tiempo medio de residencia; t es el tiempo adimensional; D_1, D_2 son los números de Damköhler; y F es el caudal volumétrico. Definamos también los vectores de estado y de control, según: $x_1=[A]/[A]^*$; $x_2=[B]/[A]^*$; $u_1=[A]_{in}/[A]^*$; $u_2=[B]_{in}/[A]^*$; donde $[A]$, $[B]$ representan concentraciones dentro del reactor; $[A]_{in}$, $[B]_{in}$ las concentraciones de alimentación; y $[A]^*$ es una concentración de referencia (arbitraria). En base a estos parámetros, el modelo matemático del sistema es:

$$dx_1/dt = -\,(1 + D_1)\,x_1 + u_1 \qquad x_1(0) = x_{10} \qquad (19.a)$$

$$dx_2/dt = D_1\,x_1 - (1 + D_2)\,x_2 + u_2 \qquad x_2(0) = x_{20} \qquad (19.b)$$

Asumamos que únicamente es posible manipular la concentración de alimentación de A (u_2=0); y consideremos el problema de determinar el control $u_1(t)$ que permite minimizar el funcional de la ecn. (13), y que para el presente caso se reduce a ($\mathbf{S}_f$=$\mathbf{0}$):

$$J = \frac{1}{2}\int_0^{t_f}\left[\mathbf{x}^T(t)\,\mathbf{W}_x\,\mathbf{x}(t) + W_u\,u_1^2(t)\right]dt \qquad (20)$$

El control óptimo por realimentación de estados se calcula a través de:

$$u_1(t) = -\,\mathbf{K}(t)\,\mathbf{x}(t) = -\,[K_1(t)\,x_1(t) + K_2(t)\,x_2(t)] \qquad (21)$$

con $K_1(t) = S_{11}(t)\,/\,W_u$; y $K_2(t) = S_{12}(t)\,/\,W_u$. Los parámetros S_{11} y S_{12} se calculan resolviendo la ecuación de Riccati (16), con $\mathbf{S}_f$=$\mathbf{0}$.

XVI.3.3. Linealización global exacta de sistemas no lineales

A partir de la década del 70, la geometría diferencial ha mostrado aportar grandes ventajas en el tratamiento riguroso de los sistemas no lineales. Un desarrollo formal de la teoría de control de sistemas no lineales puede consultarse en Isidori (1985). Kravaris y Kantor (1990a, b) presentan una muy buena revisión de los métodos geométricos aplicados al control de procesos no lineales. D'Attellis (1992) presenta una recopilación de las bases teóricas del control no lineal, y algunas aplicaciones a sistemas no lineales típicos.

Una aplicación interesante de la teoría de control de sistemas no lineales es la denominada linealización global exacta 'Entrada/Salida' (LGE E/S). A efectos de introducir los conceptos básicos relativos a la LGE E/S, consideremos un proceso representado por el siguiente modelo de estados:

$$d\mathbf{x}/dt = \mathbf{f}(\mathbf{x}) + \mathbf{g}(\mathbf{x})\, u \; ; \; \mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0 \tag{22.a}$$
$$y = \mathbf{h}(\mathbf{x}) \tag{22.b}$$

Por razones de simplicidad se ha considerado un sistema SISO, pero los resultados pueden extenderse a sistemas MIMO. La idea de la linealización E/S reside en calcular una "ley de control" basada en una realimentación no lineal de los estados del sistema, del tipo: $u = \psi(\mathbf{x},v)$, de manera tal que el modelo del proceso más la ley de control conformen un sistema *lineal* en su nueva descripción E/S (entrada=**v**; salida=**y**). Entonces, el control del proceso linealizado resultante puede efectuarse utilizando un controlador lineal clásico (por ejemplo, un PID). En la Figura 9, se representa esquemáticamente los conceptos antes mencionados. El estimador de estados se agrega para contemplar la posibilidad de que los estados del proceso puedan ser no medibles.

El cálculo de la ley de realimentación ι se efectúa en forma analítica, a partir del modelo matemático del proceso. Dada la complejidad involucrada en su deducción no se la incluye en este texto, pero se remite al lector interesado a la bibliografía arriba mencionada. Por ejemplo, una aplicación práctica de la LGE E/S a los reactores 'batch' puede encontrarse en Kravaris y Chung (1987). Cabe acotar finalmente que la teoría de linealización global es más efectiva en la medida que el modelo matemático sea una muy buena aproximación del proceso.

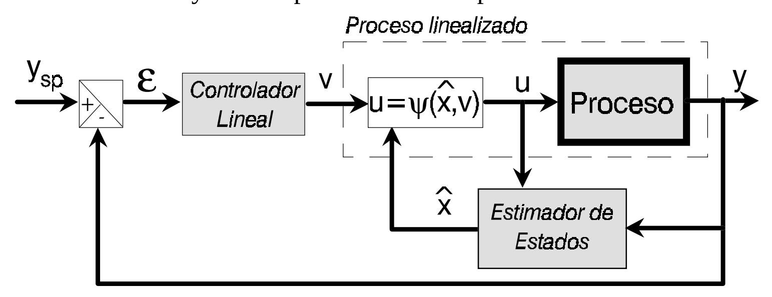


Figura XVI.9: Sistema de control por LGE E/S.

XVI.3.4. Otras estructuras de control avanzado

Las estructuras de control mencionadas en los puntos anteriores no son las únicas posibles de implementar. Por el contrario, existe un número prácticamente ilimitado de estructuras posibles, y la elección de la más conveniente para el proceso a controlar es una etapa primordial en el diseño de sistemas controlados. A continuación, y a manera de ejemplos, se mencionan posibles estructuras de control que surgen por combinación de otras anteriormente estudiadas.

Control a lazo cerrado por realimentación de estados no medibles

No es más que una estructura práctica de la ya vista en XVI.3.1., donde se incluye un bloque estimador de los estados no medibles del proceso. Obviamente, la efectividad de esta configuración será aceptable en la medida que el algoritmo estimador de estados provea estimaciones relativamente exactas, y que la dinámica del algoritmo estimador sea más rápida que las asociadas al resto del proceso.

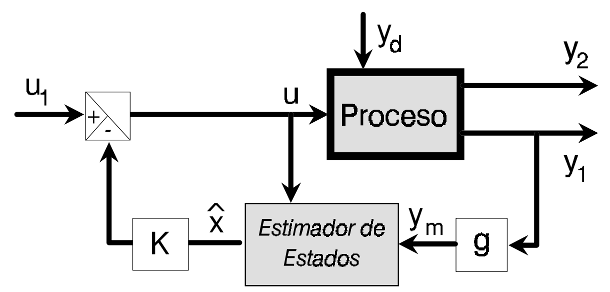


Figura XVI.10: Sistema de control a lazo cerrado por realimentación de estados no medibles.

Control combinado por realimentación de estados estimados y de salida

En esta estructura se combina una ley de realimentación de estados, u_2 (que por ejemplo puede provenir de un análisis de control óptimo), con un lazo cerrado por realimentación de salida, para poder compensar (a través de u_1) los apartamientos característicos debidos a errores de modelado, perturbaciones externas, etc.

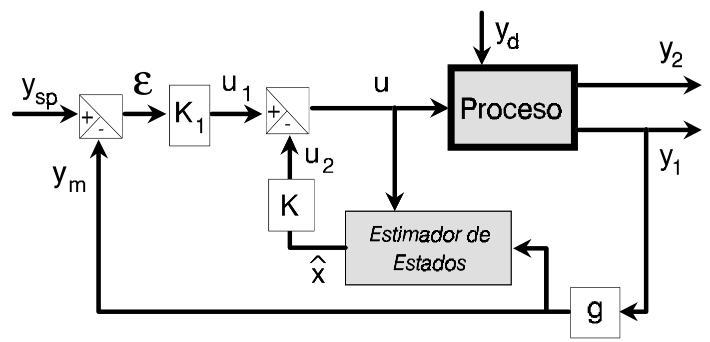


Figura XVI.11: Sistema de control a lazo cerrado combinado por realimentación de estados estimados y de salida

XVI.4. Simulación Numérica de los Procesos Controlados

En este punto, analizaremos algunos aspectos relativos a la utilidad de los modelos matemáticos y de la simulación numérica con relación al diseño de sistemas de control y a la operabilidad de los procesos controlados. Desde el punto de vista del

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

control, el simulador de un proceso puede ser utilizado con los siguientes propósitos: a) analizar la factibilidad de cambios operativos en el proceso; b) estudiar la robustez del sistema controlado ante perturbaciones externas; c) determinar ajustes alternativos de los controladores ya existentes para mejorar la ‘performance’ operativa del proceso; d) diseñar y evaluar nuevas estructuras de control a implementar en el proceso; etc.

Para poder encarar cualquier tipo de simulación, es necesario contar con un modelo matemático del proceso. En puntos anteriores, ya se ha mencionado la posibilidad de disponer de modelos con diferentes grados de aproximación, y la necesidad usual de recurrir a los MT para el diseño de algoritmos de control. Sin embargo, a los efectos de la simulación numérica, el proceso debería siempre ser simulado mediante el modelo matemático más exacto disponible (un MD).

En la Figura 12, se muestran los esquemas de bloques correspondientes a un proceso genérico no controlado, y a dos modelos posibles (uno no lineal, y otro lineal o linealizado) para ser utilizados en la simulación numérica. Los dos modelos responden a las estructuras matemáticas de las ecns. (1) y (4), y en ambos casos se supone además la existencia de perturbaciones externas al sistema de carácter aditivo en las variables de salida.

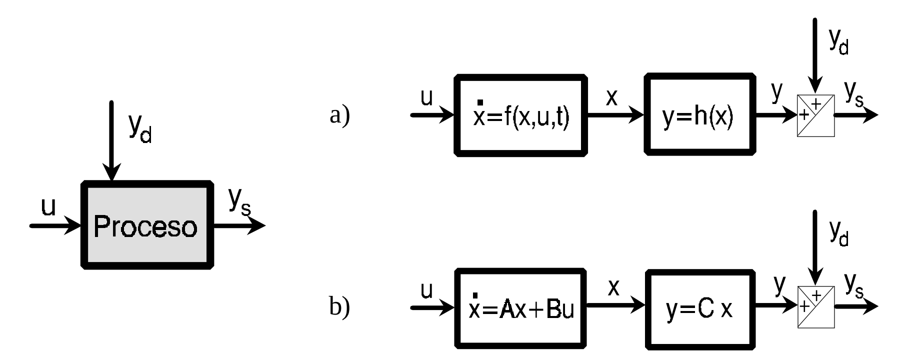


Figura XVI.12: Esquemas de bloques típicos utilizados para la simulación numérica de un proceso: a) modelo no lineal; b) modelo lineal o linealizado.

La simulación numérica de un proceso controlado involucra además de los bloques de la planta, los correspondientes a los medidores, controladores, estimadores, etc. En la Figura 13, se muestra la configuración típica para la simulación de una planta en lazo cerrado, por realimentación de la salida. Nótese que el esquema es básicamente el mismo de la Figura 3. Se ha representado al proceso real por un modelo matemático (no lineal), un controlador lineal del tipo proporcional, y la medición modelada según:

$$\mathbf{y_m} = \mathbf{g}(\mathbf{y_1}) \qquad (23)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde **g** es una función que representa la dinámica de los medidores (sensores, transmisores, etc.). En el caso más simple, $\mathbf{y_m} = \mathbf{y_1}$, lo que representa una realimentación unitaria de la salida.

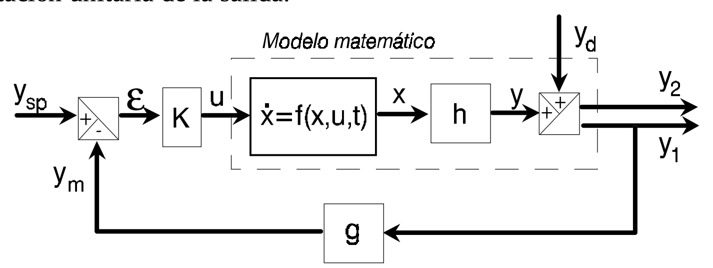


Figura XVI.13: Sistema de control a lazo cerrado por realimentación de la salida. Representación esquemática del modelo para la simulación numérica.

XVI.4.1. Estructuras típicas utilizadas en los simuladores dinámicos

Usualmente, los simuladores dinámicos de un proceso controlado están subdivididos en un conjunto de módulos, tales como los descriptos en la Tabla 3.

TABLA XVI.3. Módulos típicos para la simulación de un proceso controlado

Módulo	**Datos Recibidos**	**Resultados Provistos**
Planta	*Parámetros del modelo. Condiciones iniciales. Flujos de materia y/o de energía (intercambiados con el "exterior"). Vectores de las variables manipuladas y de las perturbaciones.*	*Vector de estados.*
Salida	*Vector de estados.*	*Vector de salidas.*
Medición	*Vector de salidas. Ruidos típicos de los sensores.*	*Vector de mediciones.*
Controlador	*"Set points". Vectores de mediciones, de estados estimados, y de parámetros estimados. Parámetros de ajuste de cada controlador.*	*Vector de variables accionadas.*
Accionador	*Vector de variables accionadas.*	*Vector de variables manipuladas.*
Estimación y Adaptación	*Vectores de variables manipuladas y de mediciones.*	*Vectores de estados estimados y de parámetros estimados.*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Consideremos una breve descripción del contenido de cada uno de los módulos.

1. *Módulo de simulación de la planta*. Por lo general, es el módulo más grande y de mayor complejidad. Incluye el modelo matemático detallado del comportamiento dinámico del proceso no controlado, y rutinas numéricas para la resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales. Recibe información sobre las condiciones de simulación (tiempo de simulación, métodos numéricos a emplear, paso de integración, etc.), los parámetros físico-químicos, y las variables manipuladas. Provee la evolución temporal de los estados del proceso.
2. *Módulo de salida*. Es un módulo simple, conformado exclusivamente por ecuaciones algebraicas. Calcula las evoluciones temporales de las variables de interés, en base a los estados provistos por el módulo de simulación de la planta.
3. *Módulo de medición*. Incluye la dinámica de los medidores (sensores, transductores, líneas de medición, etc.) y el ruido típico de los sensores. Permite simular la medición real. Sobre aspectos relativos a este módulo se profundizará más en el Capítulo XX.
4. *Módulo de los controladores*. En este módulo se incluye la "ley de control" utilizada. Por ejemplo, la ecuación tecnológica [ecn. (5)] de un controlador lineal, o la ley de realimentación de estados en un sistema de control avanzado.
5. *Módulo de los accionadores*. Incluye el comportamiento dinámico de los órganos de acción final (por ejemplo, la dinámica de apertura y cierre de una válvula).
6. *Módulo de estimación y adaptación.* Este módulo sólo está presente en los sistemas de control avanzado. Por ejemplo, cuando la ley de control incluye realimentación de estados no medibles; o adaptación en línea de parámetros. La información provista es sólo requerida por el módulo 4).

XVI.4.2. Un ejemplo simulado de un sistema de control de niveles

Consideremos el sistema representado esquemáticamente en la Figura 14, correspondiente a un proceso ya existente, más una expansión futura prevista (indicada en líneas de trazos). El Proceso 1 impone una demanda de agua (q_{p1}). Una demanda típica de un día de operación se indica en la misma figura. El agua utilizada por el proceso es acondicionada en forma previa a su uso en el tanque acondicionador, para lo cual es necesario regular el nivel de agua (h_2) en 0,9 m. El 90% del agua utilizada por el Proceso 1 se recupera y se recicla al tanque de reserva. El caudal de alimentación adicional de agua al tanque 1 (q_0) es constante, y permite compensar el 10% perdido en el Proceso 1. La regulación de h_2 se efectúa accionando el grado de apertura (p) de la válvula de salida del tanque de reserva, cuya característica 'q_1 - p'

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

es lineal. La medición de h_2 se considera exacta. En la Tabla .4 se indican los parámetros de simulación y las condiciones operativas del sistema.

Se pretende utilizar un simulador dinámico del proceso con el objeto de:

a) Verificar si el ajuste actual del controlador proporcional es el adecuado;
b) Analizar la posibilidad de implementar la expansión del sistema, determinando posibles modificaciones en la planta, reajuste del controlador, y valor de la restricción R;
c) Evaluar si se justificaría adicionar un efecto integral y/o derivativo al controlador, para el sistema expandido.

TABLA XVI.4. Parámetros y condiciones operativas del sistema

	Tanques	q_0 [m^3/hr]	Rangos de h_2 [m]	K_p	$h_{2,sp}$ [m]
Sistema Original	A_1=0,3 m^2 H_1=5,0 m; A_2=0,1 m^2 H_2=1,0 m;	1,77	0,85<h_2<0,95	50	0,9
Expansión	A_3=0,1 m^2; H_3=1,0 m;	1,94	0,50<h_3<1,0	50	0,9

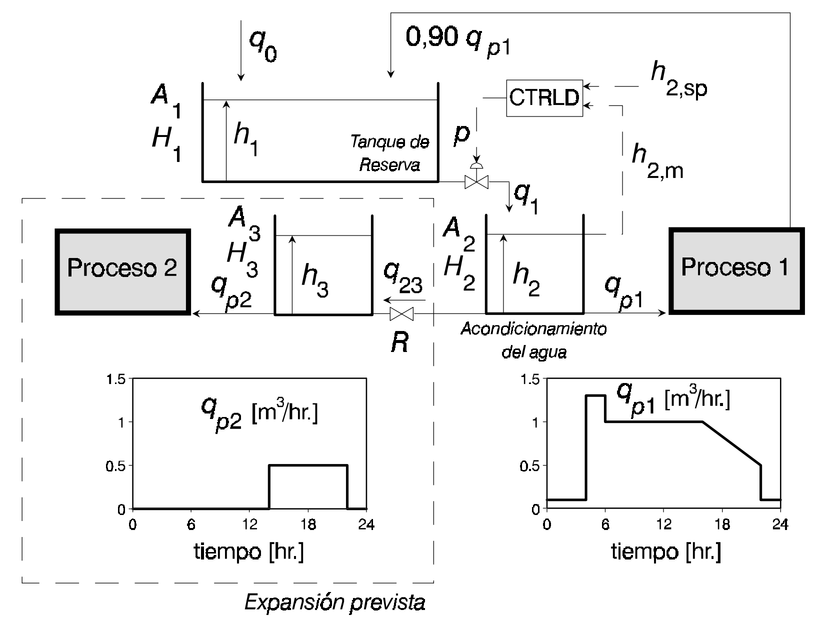


Figura XVI.14. Sistema de control de niveles. Evaluación del proceso actual y de la expansión futura.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Para evaluar los puntos anteriores se requiere disponer de un modelo matemático del sistema, y efectuar un conjunto de simulaciones. A continuación, describimos las expresiones matemáticas involucradas en cada uno de los módulos del simulador dinámico, con una clasificación semejante a la utilizada en la Tabla 3.

Módulo de simulación de la planta. En forma similar a lo ya visto en el Capítulo XIV, pueden plantearse las siguientes ecuaciones de balance de materia:

$$A_1 \, dh_1/dt = q_0 + 0{,}9 \, q_{p1} - q_1 \quad ; h_1(0) = h_1^0 \tag{24.a}$$

$$A_2 \, dh_2/dt = q_1 - q_{p1} - q_{23} \quad ; h_2(0) = h_2^0 \tag{24.b}$$

$$A_3 \, dh_3/dt = q_{23} - q_{p2} \quad ; h_3(0) = h_3^0 \tag{24.c}$$

con:

$$q_1 = k \, p \, (h_1)^{1/2} \quad ; \; 0 \leq p \leq 1 \tag{24.d}$$

$$q_{23} = R \, \mathrm{sgn}(h_2 - h_3) \, (|h_2 - h_3|)^{1/2} \tag{24.e}$$

En la ecn. (24.e) la función 'signo' y el valor absoluto de la diferencia $h_2 - h_3$ permiten tener en cuenta cualquier sentido del flujo q_{23}, como ya se explicó en el ejemplo final del Capítulo XIV.

Módulo de salida. La única variable de salida de interés en este problema es h_2, entonces:

$$y = h_2 \tag{24.f}$$

Módulo de medición. Como se asume que la medición es exacta, entonces:

$$y_m = h_{2,m} = h_2 \tag{24.g}$$

Módulo del controlador. Se utiliza la ecuación tecnológica del controlador proporcional; es decir:

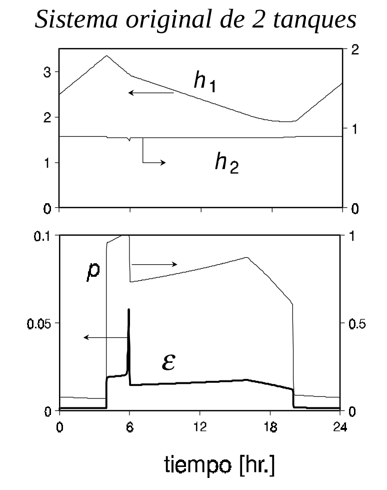
$$p = K_p \, (h_{2,sp} - h_{2,m}) \tag{24.h}$$

Módulo del accionador. El accionador ya está incluido en el modelo de la planta [ecn. (24.d)].

En la Figura 15, se muestran los resultados de simulación del sistema original y del expandido, con el mismo ajuste original del controlador (K_p=50). En el sistema original se observa que las variables evolucionan dentro de los rangos especificados, aunque se nota una leve saturación de la apertura de la válvula (p=1), para $t \cong 6$ hrs. El error en la regulación de h_2 se mantiene siempre por debajo de 0,1 m.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Sistema original de 2 tanques



Sistema expandido de 3 tanques

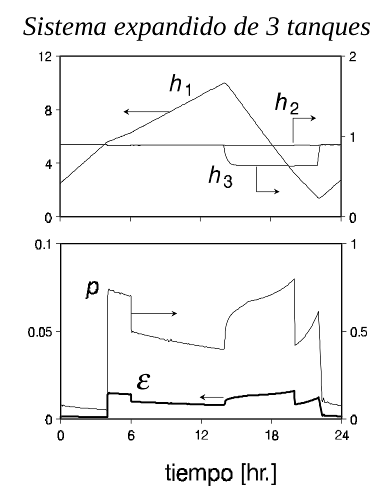


Figura XVI.15. Resultados de simulación de los sistemas original y expandido.

Cuando se simula el sistema expandido, se adoptó un valor de la restricción R=1. El error en la regulación de h_2 es similar al del caso anterior, y la válvula de control se encuentra más alejada de la saturación (p<1). Sin embargo, se requiere un tanque de reserva de una altura considerablemente superior a la original ($h_1 \cong 10$ m). Aunque no se muestran resultados, las simulaciones indicaron que no se logran mejoras sustanciales en el sistema de control al incorporar efectos derivativos y/o integrales al controlador, por lo que tales reajustes serían en principio descartados.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

PROBLEMAS PROPUESTOS

P.1) a) Determinar el modelo matemático linealizado asociado a la ecn. (2), considerando $q_2 = h/R$; y expresar el nuevo modelo de estados. [Nótese que las matrices **A**, **B** y **C** de las ecns. (4) se reducen a escalares]. b) Fijar A=1 m^2, R=10 m^{-2} min^{-1}, y q_1=0,1 m^3/min. Calcular la evolución temporal del nivel de agua, y comprobar que h^e=1 m es el único estado estacionario del sistema, independientemente del nivel inicial de agua en el tanque. c) Colocar un controlador proporcional con el objeto de regular h=0,5 m, manipulando q_1. Determinar la máxima ganancia del controlador para obtener evoluciones de h no oscilatorias.

P.2) Considerar el ejemplo del punto XVI.2.3 (Fig. 6). Determinar las constantes del controlador P+I, según el método de la "curva de reacción".

P.3) Considerar el esquema cinético de la ecn. (18). a) Derivar el modelo matemático de las ecns. (19), y determinar las matrices **A**, **B** y **C** del modelo de estados, si la variable de interés es x_2 y sólo se manipula u_1. b) Determinar el control óptimo que minimiza el funcional de la ecn. (20), cuando no interesa la trayectoria de x_1 (nótese que el integrando de la ecn. (20) se reduce a $x_2^2+u_1^2$).

P.4) a) Determinar el modelo de estados linealizado del problema XVI.4.2, para el proceso "actual" y linealizando alrededor de los valores medios de los niveles observados en la Figura 15. b) Simular el sistema linealizado, y comparar con los resultados de la Figura 15. c) Determinar el valor de la constante proporcional que no produce soluciones oscilatorias en los niveles de agua.

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Amy, L. (1992). "*Automation Systems for Control and Data Acquisition*", Instrument Society of America (ISA), North Carolina.
- Bishop, R. (1993). "*Modern Control System Analysis and Design Using MATLAB*", Addison-Wesley Pub. Co., Reading, Massachusetts.
- Bryson, A. y Y. Ho (1975). "*Applied Optimal Control. Optimization, Estimation and Control*", J. Wiley & Sons, New York.
- D'Attellis, C. (1992). "*Introducción a los Sistemas No Lineales de Control y sus Aplicaciones*", AADECA, Buenos Aires.
- Isidori, A. (1985). "*Nonlinear Control Systems: An Introduction*", M. Thoma Ed., Springer-Verlag.
- Kravaris, C. y C. Chung (1987). "*Nonlinear State Feedback Synthesis by Global Input/Output Linearization*", AIChE J., 33, 4, 592.
- Kravaris, C. y J. Kantor (1990,a). "*Geometric Methods for Nonlinear Process Control. 1. Background*", Ind. Eng. Chem. Res., 29, 2295.
- Kravaris, C. y J. Kantor (1990,b). "*Geometric Methods for Nonlinear Process Control. 2. Controller Synthesis*", Ind. Eng. Chem. Res., 29, 2310.
- Kuo, B. (1996). "*Sistemas de Control Automático*", 7ª Ed., Prentice Hall

Hispanoamérica, S.A., México.
- Kuo, B. y D. Hanselman (1994). "*Matlab Tools For Control System Analysis And Design*", Prentice Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.
- Landau, Y. (1979). "*Adaptive Control. The Model Reference Approach*", Marcel Dekker, Inc., New York.
- Ogata, K. (1970). "*Modern Control Engineering*", Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Ray, W. (1981). "*Advanced Process Control*", McGraw-Hill, Inc., Chemical Engineering Series, New York.
- Ray, W. y D. Lainiotis (1978). "*Distributed Parameter Systems. Identification, Estimation, and Control*", Control and Systems Theory Series, Vol 6, Marcel Dekker, Inc., New York.
- Stephanopoulos, G. (1984). "*Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice*", Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Takahashi, Y., M. Rabins y D. Auslander (1977). "*Control and Dynamic Systems*", Addison-Wesley Pub. Co., Reading, Massachusetts.

CAPÍTULO XVII

SIMULACIÓN DINÁMICA DE EQUIPOS ESPECÍFICOS

Por
Enrique E. Tarifa y Nicolás J. Scenna

XVII.1 INTRODUCCIÓN

En este capítulo se presentarán simuladores dinámicos específicos desarrollados en base a las técnicas presentadas en los Capítulos XIV y XV. Los equipos que se simularán son: Un evaporador de propano, un desalador MSF y un reactor *batch* productor de sulfoleno. Estos ejemplos fueron seleccionados porque las características de los equipos cubren un amplio rango de casos reales, desde un equipo simple hasta procesos de grandes dimensiones y procesos *batch*.

En todos los casos se construirán modelos globales u orientados a ecuaciones. Este es el enfoque más conveniente para desarrollar simuladores. En efecto, así es posible su utilización en diversos tipos de problemas, como ser adaptaciones del modelo para resolver problemas de optimización, síntesis de lazos de control, etc. Además, ya vimos que se caracterizan por su eficiencia y velocidad de cálculo.

Los modelos que se presentarán en este capítulo están constituidos por dos sistemas de ecuaciones acoplados. El primero es un sistema de ecuaciones algebraicas mientras el segundo es un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, con el tiempo como variable independiente. Es este último, como ya conocemos, el que hace que los modelos sean dinámicos. En general, se aplicarán los pasos ya vistos en el modelado de diversos equipos analizados en los Capítulos XIV y XV.

XVII.2 EVAPORADOR DE PROPANO

XVII.2.1 Descripción del Proceso

En la Figura (XVII.1) se muestra el esquema del equipo a simular. El sistema toma propano líquido de un depósito a través de la bomba *BL*. La presión y la temperatura en el depósito se mantienen constantes. El líquido que llega al evaporador es calentado por un serpentín por el cual circula agua caliente. El agua es suministrada por la bomba *BP*. El vapor producido es destinado a una batería de equipos que mantienen la presión de descarga P_2 constante.

El sistema se completa con tres controladores del tipo *P+I*. El primero se encarga de mantener el nivel de líquido *L* manipulando la válvula *VL* de la línea de entrada de propano líquido. El segundo controla la presión *P* regulando la válvula de alimentación de agua caliente *VP*. Finalmente, está el controlador del caudal de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

salida W_2, que determina la apertura de la válvula *VW*.

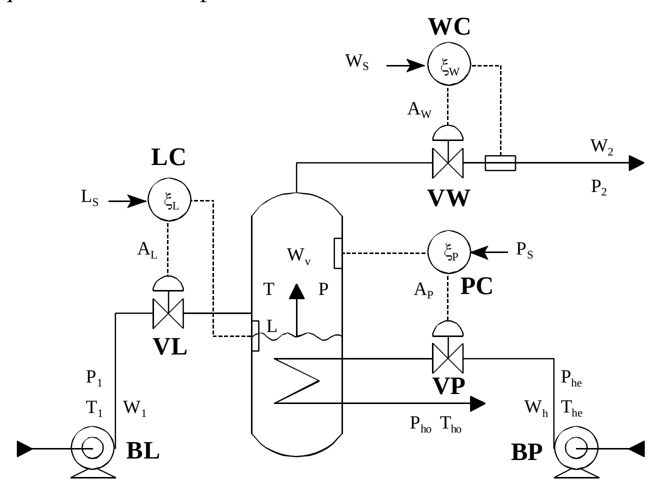


Figura XVII.1: Evaporador de propano.

XVII.2.2 Construcción del Modelo

Las hipótesis adoptadas durante la construcción del modelo son:

- La temperatura del vapor es la misma que la del líquido en todo instante.
- La presión del vapor es igual a la presión de equilibrio correspondiente a la temperatura del vapor.
- El vapor se comporta idealmente.

Como ya se planteó, el modelo estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales y otro de ecuaciones algebraicas. El sistema de ecuaciones diferenciales correspondiente surge de plantear los balances en forma dinámica. También dan origen a ecuaciones diferenciales el comportamiento especial de algunos equipos, como por ejemplo los controladores con efecto integral. Por otro lado, el sistema de ecuaciones algebraicas está integrado por las ecuaciones de estado, correlaciones, relaciones geométricas, etc. En este caso, dan origen a ecuaciones algebraicas los balances que se plantean en sistemas con constantes de tiempo muy pequeñas. Por ejemplo, cuando se aplica el balance de materia en una unión de tuberías se considera que el transitorio es despreciable; por lo tanto, el balance involucra una ecuación algebraica.

A continuación se discutirá la construcción de ambos sistemas de ecuaciones para el evaporador. En primer lugar, los balances de materia y energía en la fase líquida dan origen a las siguientes ecuaciones:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\rho_l \; S \; \frac{dL}{dt} = W_1 - W_v \qquad (1)$$

$$Cp_l \; \rho_l \; S \; \frac{d(\,L\;T\,)}{dt} = Cp_1 \; W_1 \; T - (Cp_l \; T + \lambda_v) \; W_v + Q \qquad (2)$$

donde:
W_1: Caudal de alimentación.
W_v: Caudal de líquido evaporado.
Q: Calor transferido desde el serpentín hacia la fase líquida.
S: Área transversal del evaporador.
L: Altura del nivel del líquido.
T: Temperatura en el evaporador.
ρ_l: Densidad del líquido.
Cp_l: Capacidad calorífica del líquido.
λ_v: Calor de evaporación a la temperatura y presión del evaporador.

Hasta aquí se han planteado los balances que se consideran que rigen la dinámica del sistema. Ahora queda plantear las correlaciones que se utilizarán para calcular las propiedades físico-químicas, las relaciones funcionales de algunos equipos, balances estacionarios, etc.

Un ejemplo de balance pseudo-estacionario es el balance de vapor que se realiza en la campana:

$$W_v = W_2 \qquad (3)$$

donde se considera que la masa M de vapor en la campana alcanza rápidamente el equilibrio.

Al considerar la fase gas ideal y que la presión del vapor es la correspondiente al equilibrio líquido-vapor, se puede plantear la ecuación de Antoine:

$$\ln\;(P) = \gamma_1 - \frac{\gamma_2}{T + \gamma_3} \qquad (4)$$

donde γ_i son las constantes correspondientes para el propano.

Planteando la ley de los gases ideales se obtiene:

$$P\;(V - S\;L) = \frac{M}{PM}\;R\;T \qquad (5)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

expresión que podemos utilizar para determinar M, donde:

V: Volumen total del evaporador.

$V - S\,L$: Volumen de la campana del evaporador (volumen total menos el volumen ocupado por la masa líquida).

PM: Peso molecular del propano.

R: Constante de los gases ideales.

La bomba *BL* es una bomba centrífuga con la siguiente curva característica:

$$P_1 = \beta_1 + \beta_2\ W_1 + \beta_3\ W_1^2 \tag{6}$$

donde:

P_1: Presión de descarga.

W_1: Caudal bombeado.

β_i: Constantes cuando se fija el tipo de bomba, la presión de carga, el diámetro de impulsor y las revoluciones.

De la misma forma se modela la bomba *BP*. Por otra parte, la válvula *VP*, válvula del tipo lineal, da origen a la siguiente ecuación:

$$W_h = Cv_P\ A_P\ \sqrt{\rho_h\ (P_{he} - P_{ho})} \tag{7}$$

donde:

A_P: Fracción de abertura de la válvula, varía entre *0* y *1*.

P_{he}: Presión de descarga de la bomba *BP*.

P_{ho}: Presión del serpentín.

Cv_p: Capacidad de la válvula.

En cambio la válvula *VL*, del tipo igual porcentaje, se modela con:

$$W_1 = Cv_L\ \alpha_L^{A_L - 1} \sqrt{\rho_1\ (P_1 - P)} \tag{8}$$

donde:

A_L: Fracción de abertura de la válvula (varía entre *0* y *1*).

P: Presión del evaporador.

Cv_L: Capacidad de la válvula.

La válvula *VW* también es del tipo igual porcentaje pero ahora se tiene una fase vapor, la ecuación es:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$W_2 = Cv_W \, \alpha_L^{A_W - 1} \sqrt{(P^2 - P_2^2) \, \frac{PM}{T}} \tag{9}$$

donde:

A_W: Fracción de abertura de la válvula (varía entre *0* y *1*).
P_2: Presión de descarga del evaporador.
W_2: Caudal de vapor que sale del evaporador.
T: Temperatura del evaporador.

Por otra parte, dado que la masa del serpentín y los cambios esperados en la temperatura del líquido de calefacción son despreciables frente los relacionados con el evaporador, se toma el balance de energía como pseudo-estacionario. Entonces, se tiene:

$$Q = W_h \, Cp_h \, (T_{he} - T_{ho}) \tag{10}$$

Otra relación la brinda el planteo de la correspondiente ecuación de transferencia:

$$Q = UA \, \Delta T_{ml} \tag{11}$$

$$\Delta T_{ml} = \frac{T_{he} - T_{ho}}{\ln \left(\frac{T_{he} - T}{T_{ho} - T} \right)} \tag{12}$$

donde:

UA: Es el producto del coeficiente global de transferencia con el área de intercambio.
ΔT_{ml}: Es el la diferencia de temperatura media logarítmica.

Todos los controladores involucrados en el ejemplo bajo análisis son del tipo *P+I*. El controlador de nivel está representado por las siguientes ecuaciones:

$$A_L = K_L \left(\xi_L + \frac{60}{\theta_L} \int \xi_L \, dt \right) + A_{L0} \tag{13}$$

$$\xi_L = L_s - L \tag{14}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde A_L está limitado entre *0* y *1*.

A fin de eliminar el término integral de la Ecuación. (13) se define la variable intermedia AI_L de la siguiente manera:

$$AI_L = \int \xi_L \, dt \tag{15}$$

Por lo tanto, la Ecuación (13) es reemplazada por una ecuación algebraica y otra diferencial:

$$A_L = K_L \left(\xi_L + \frac{60}{\theta_L} AI_L \right) + A_{L0} \tag{16}$$

$$\frac{dA_L}{dt} = \xi_L \tag{17}$$

De manera similar se modela el control de presión y el control de caudal de descarga.

XVII.2.3 Resolución del Modelo

Como se mencionó en los Capítulos XIII y XIV, para resolver el sistema se deben conocer previamente los valores de las variables diferenciales. Los valores iniciales de estas variables deben ser suministrados como datos de entrada al simulador. Estos valores iniciales permiten que se resuelva el sistema de ecuaciones algebraico para determinar los valores de las restantes variables, si no fueran ingresadas como dato. De esta manera, al conocer el valor de todas las variables, se ha determinado el estado inicial del sistema.

El próximo paso es calcular, a partir del estado actual, el siguiente estado. En otras palabras, conocido el estado en el tiempo t, se determinará el estado que corresponde al tiempo $t+\Delta t$. Para ello, como vimos en los capítulos anteriores, se integra el sistema de ecuaciones diferenciales a fin de obtener los nuevos valores de las variables diferenciales correspondientes al tiempo $t+\Delta t$. Luego, se resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas para determinar por completo el nuevo estado. Repitiendo este procedimiento, es posible calcular todos los estados por los que evolucionará el sistema.

En el caso del evaporador, las variables diferenciales son: L (nivel del líquido), T (temperatura en el evaporador), y los AI_i (los efectos integrales de los controladores). Por lo tanto, habrá que suministrar los valores iniciales. Se deja al lector el análisis del esquema de cálculo del miembro derecho, dadas las variables diferenciales.

En las Figuras (XVII.2) y (XVII.3) se puede ver la evolución de las variables

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

más importantes del proceso cuando se simula una elevación del *set point* L_S en el controlador *LC* para un ejemplo particular, dándole valores específicos a los parámetros del problema. Dado que el sistema está altamente controlado, las variables retornan a su valor normal, excepto *L*, cuyo valor se pretende variar.

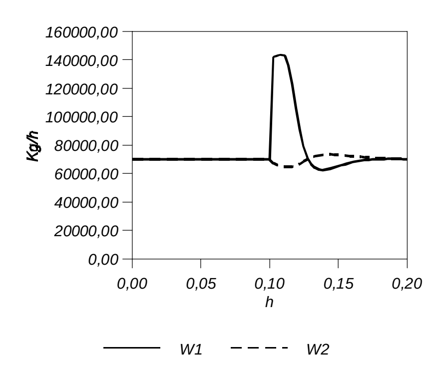


Figura XVII.2: Respuesta a la elevación de L_S.

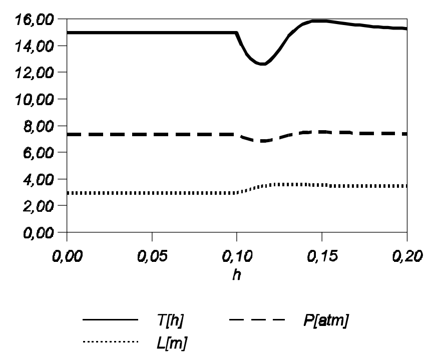


Figura XVII.3: Respuesta a la elevación de L_S.

En las Figuras (XVII.4) y (XVII.5) se muestra lo que ocurre con estas variables cuando se simula una disminución en el *set point* de dicho controlador. Nuevamente, la mayoría de las variables retoman su valor original, mientras *L* adopta el nuevo valor de consigna que se dio al controlador.

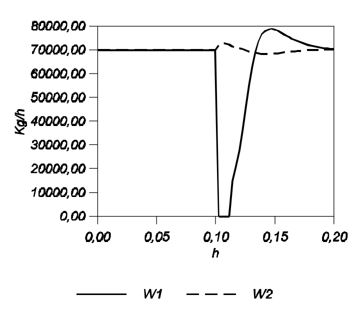


Figura XVII.4: Respuesta a la disminución de L_S.

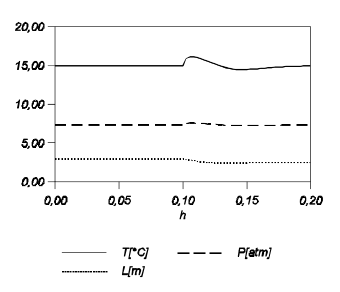


Figura XVII.5: Respuesta a la disminución de L_S.

En este caso, como en la mayoría de los modelos resueltos en los capítulos anteriores (salvo el modelo riguroso para una torre de destilación), se ha utilizado una rutina de integración explícita, concretamente Runge-Kutta de cuarto orden.

En la próxima sección analizaremos un ejemplo en el cual se incorporan varias unidades en serie, de una dimensión similar al evaporador ya visto. El proceso es un evaporador múltiple flash, para desalación de aguas de mar, que ya hemos discutido en los Capítulos II y V. Allí comentamos que para analizar la performance

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de las distintas estructuras posibles para el sistema, teniendo en cuenta todas las variables y métodos operativos, era imprescindible desarrollar un simulador dinámico. También comentamos que resulta difícil encontrar en un simulador genérico, módulos para este proceso, por lo que, o bien construimos un simulador particular, o bien desarrollamos un módulo como el propuesto utilizando las facilidades de los simuladores comerciales genéricos que permiten incorporar programas desarrollados por el usuario. En cualquier caso, necesitaremos desarrollar un modelo.

XVII.3 DESALADOR POR EVAPORACIÓN MÚLTIPLE FLASH

XVII.3.1 Descripción del Proceso

El segundo ejemplo que se estudiará en este capítulo es un modelo para la simulación dinámica de un sistema de desalación del tipo MSF (Múltiple Stage Flash, o sistema de evaporación flash múltiple etapa). Este sistema ya fue descrito en el Capítulo V cuando se analizó el diagrama de flujo asociado al proceso. En este ejemplo trataremos un equipo "académico" compuesto por diez unidades secuenciales de flasheo (ver Figura (XVII.6)).

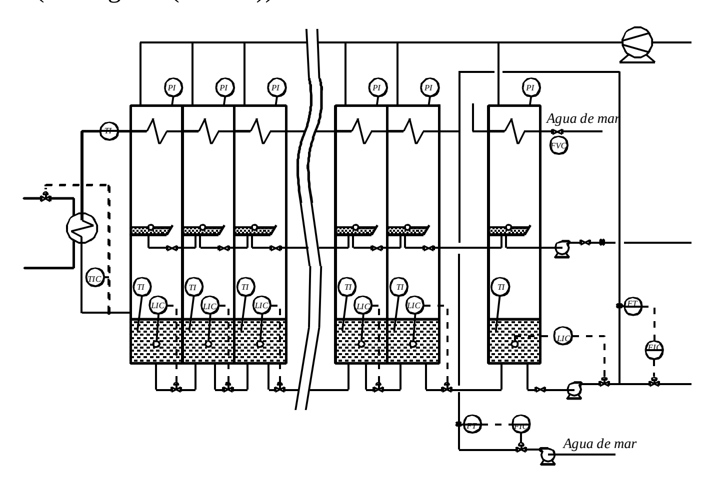


Figura XVII.6: Desalador MSF.

A diferencia del esquema mostrado en el Capítulo V, aquí se utiliza un diagrama del equipo de evaporación un poco más completo, aunque aún no se considera un número importante de equipos auxiliares, cañerías, etc.

El proceso, según vimos, consiste en una serie de etapas de flasheo donde se produce la evaporación de agua de mar para obtener agua destilada. La corriente de condensado, al pasar de una etapa a otra, también sufre evaporaciones parciales debido al gradiente de presiones que se mantiene entre las etapas. La fracción de condensado que se evapora es del *10%* al *15%*. Debido a problemas de corrosión, la

temperatura del calentador principal no puede superar los *120 °C*. Por el mismo motivo, la corriente de agua de mar que alimenta al proceso es previamente tratada en forma adecuada. Para minimizar los costos de este tratamiento, una fracción de la salmuera concentrada es reciclada. El reciclo tiene un límite fijado por la máxima concentración promedio admisible en el equipo (es función de los materiales y de la vida útil del diseño).

Tanto la salmuera como el destilado evolucionan en contracorriente con la corriente de alimentación de agua de mar (agua fresca más el reciclo) a los efectos de aprovechar la diferencia de temperatura existente para producir la condensación del vapor junto con el precalentamiento de la corriente de alimentación. Esto se lleva a cabo en los intercambiadores ubicados en la parte superior de cada evaporador. Tanto la condensación del vapor como el empleo de una bomba para retirar los incondensables originan un gradiente de presiones entre las etapas.

Dentro de este contexto, el simulador dinámico debe contemplar todos los aspectos citados a fin de que los resultados obtenidos sean lo más exactos posibles. Además, deberá ser lo suficientemente robusto a fin de poder manejar sin problemas las perturbaciones provocadas en las simulaciones.

XVII.3.2 Construcción del Modelo

El modelo a desarrollar será global u orientado a ecuaciones. Sin embargo, dado el gran tamaño del sistema, para construir el modelo global conviene analizar al proceso por etapas.

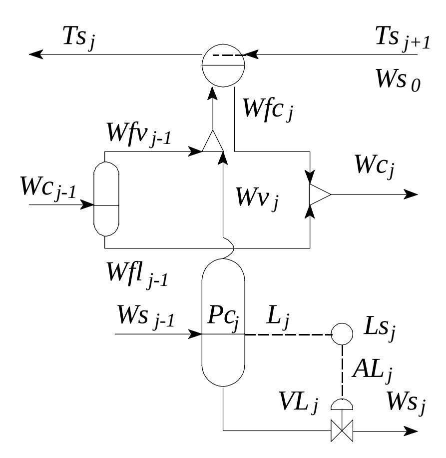


Figura XVII.7: Etapa *j* del desalador.

En las Figuras (XVII.7) a (XVII. 9) se pueden apreciar las etapas que se originan a partir de esta división: una etapa general *j* que representa a todas las etapas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

intermedias, una etapa inicial y una final. Luego, se construirán los modelos correspondientes a cada etapa. Finalmente, estos modelos se ensamblarán para dar origen al modelo global deseado. Nótese que al existir etapas, el modelo será muy similar a los discutidos para el caso de torres de destilación (cascadas múltiple etapa), si bien los fenómenos de transferencia de calor y materia que se producen sean de naturaleza diferente.

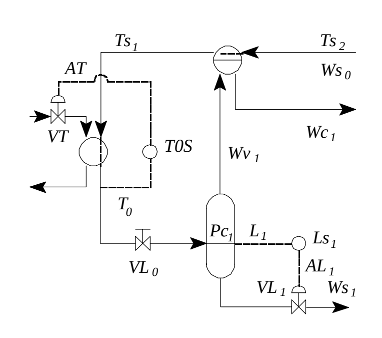


Figura XVII.8: Primera etapa.

Como ya se discutió en el Capítulo V, cada etapa puede ser considerada como una integración de los siguientes módulos:

- *Una unidad flash para la salmuera:* Es el equipo principal de la etapa.
- *Una unidad flash para el condensado:* Sirve para modelar la evaporación parcial del condensado que llega de la etapa anterior a la considerada.
- *Un sumador para las corrientes de vapor:* Suma la corriente de vapor principal (proveniente de la salmuera) con la secundaria (proveniente de la evaporación parcial del condensado).
- *Un sumador para las corrientes de condensado:* Suma la corriente de condensado principal (proveniente de condensar el vapor) con la de condensado secundario (que es el condensado no evaporado).
- *Un intercambiador de calor:* Es el equipo que se utiliza como condensador del vapor, y como precalentador de la corriente de alimentación del sistema.

Al igual que el ejemplo de la sección anterior, el modelo dinámico del desalador está compuesto por un sistema de ecuaciones diferenciales y un sistema de ecuaciones algebraicas. La nomenclatura a emplearse corresponde a las Figuras (XVII.7) a (XVII.9).

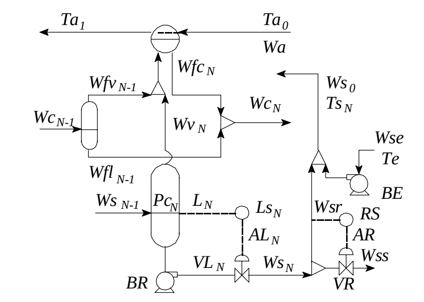


Figura XVII.9: Última etapa.

En la construcción del modelo, se adoptan las siguientes hipótesis:

- Únicamente se considera la dinámica de los evaporadores de salmuera.
- Se desprecian las pérdidas calóricas del equipo.
- Se desprecia la variación de los coeficientes peliculares de transferencia de calor con la temperatura, caudal, etc.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- No se modela la dinámica del equipo de vacío. Se considera que todos los incondensables que ingresan son adecuadamente extraídos por el sistema de vacío y en forma instantánea.
- Se considera que el agua de mar es una solución acuosa de una única especie: el cloruro de sodio, denominada en adelante sal.

Las ecuaciones de los balances de materia para una *etapa j* son:

$$\frac{dMw_j}{dt} = Ws_{j-1}\,(\,1 - X_{j-1}\,) - Wve_j - Ws_j\,(\,1 - X_j\,) \qquad (18)$$

$$\frac{dMs_j}{dt} = Ws_{j-1}\,X_{j-1} - Ws_j\,X_j \qquad (19)$$

$$\frac{dMv_j}{dt} = Wve_j + Wfv_{j-1} - Wv_j \qquad (20)$$

donde *Mw* es el *holdup* de agua, *Ms* es el *holdup* de sal, *Mv* es el *holdup* de vapor, y *X* es la concentración de sal.

Se puede demostrar que el balance de energía en la *etapa j* da lugar a la siguiente ecuación:

$$Mt_j\,Cps_j\,\frac{dT_j}{dt} = Ws_{j-1}\,Cps_{j-1}\,(\,T_{j-1} - T_j\,) - Wve_j\,\lambda vs_j \qquad (21)$$

donde *Mt* es el *holdup* de salmuera (suma del *holdup* de sal y agua), *λvs* es el calor latente del agua, *Wve* es el caudal evaporado y *Cps* es la capacidad calorífica de la salmuera.

Dado que en el modelo del proceso tiene varios controladores, son necesarias nuevas ecuaciones diferenciales para modelar su comportamiento de la misma forma que se hizo con el evaporador de propano. En efecto, en esa sección se vio que otra fuente de ecuaciones diferenciales es la parte integral de los controladores *P+I*. Por lo tanto, cada controlador dará lugar a una ecuación diferencial de la forma:

$$\frac{dAIy}{dt} = Ey \qquad (22)$$

donde *AIy* es la acción integral del controlador y *Ey* es el error de la variable controlada.

Hasta aquí se plantearon las ecuaciones diferenciales del modelo, ahora es el turno de las ecuaciones algebraicas. Para cada unidad *j* (*j = 1, ..., N*), se plantean

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

las siguientes ecuaciones algebraicas:

$$Mt_j = Mw_j + Ms_j \tag{23}$$

$$X_j = \frac{Ms_j}{Mt_j} \tag{24}$$

$$L_j = \frac{Mt_j}{\rho s_j \; S_j} \tag{25}$$

donde *S* es la sección transversal de la unidad, y ρs es la densidad de la salmuera.

Considerando la hidráulica del sistema se plantea la caída de presión entre dos etapas según:

$$\Delta P_j = Pc_j - Pc_{j+1} + g \; (\; L_j \; \rho s_j - L_{j+1} \; \rho s_{j+1} \;) \tag{26}$$

donde *L* es la altura de salmuera, *Pc* la presión en cada etapa y *g* es la aceleración de gravedad.

Para la campana (parte superior) perteneciente a la *etapa j* se puede escribir:

$$Vc_j = V_j - L_j \; S_j \tag{27}$$

$$Pc_j = \frac{R \; Mv_j \; T_j}{PM \; Vc_j} \tag{28}$$

donde *V* es el volumen total de la unidad, *L.S* es el volumen de la salmuera, *PM* es el peso molecular del agua, y *Vc* es el volumen de la campana.

La masa evaporada o flujo de vapor es calculada según la siguiente expresión:

$$Wve_j = KLA_j \; S \; (\; P_j - Pc_j \;) \tag{29}$$

donde P_j es la presión de equilibrio entre el vapor y la salmuera en cada etapa, y *KLA* es el pseudocoeficiente global de transferencia de materia introducido en el Capítulo XIV.

Para los precalentadores se pueden escribir las siguientes ecuaciones:

$$Ws_0 \; Cps_0 \; (\; Ts_j - Ts_{j+1} \;) = UA_j \; \Delta Tm_j \tag{30}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde U es el coeficiente global de transferencia de energía, A es el área de

$$UA_j \ \Delta Tm_j = Wv_j \ \lambda vsc_j \tag{31}$$

$$\Delta Tm_j = \frac{(Tc_j - Ts_j) + (Tc_j - Ts_{j+1})}{2} \tag{32}$$

transferencia, Cps es la capacidad calorífica de la salmuera, ΔTm es la diferencia de temperatura media, y λvsc es el calor latente del vapor condensado. Observe que en la Ecuación (31) se ha despreciado el aporte de energía de Wfv. Esto facilita grandemente la resolución del sistema de ecuaciones. Un conjunto similar de ecuaciones se utiliza para modelar el condensador de la etapa final (*etapa N*) y del calentador principal (*etapa 1*).

Para modelar la evaporación de los condensados se plantean las siguientes ecuaciones:

$$Wfv_{j-1} = \frac{Wc_{j-1} \ Cpw_j \ (Tc_{j-1} - Tc_j)}{\lambda vsc_j} \tag{33}$$

$$Wfl_{j-1} = Wc_{j-1} - Wfv_{j-1} \tag{34}$$

$$Wfc_j = Wfv_{j-1} + Wv_j \tag{35}$$

$$Wc_j = Wfc_j + Wfl_{j-1} \tag{36}$$

donde Cpw es la capacidad calorífica del agua.

Para modelar el sistema de recirculación se emplean las siguientes ecuaciones:

$$Wsr = Ws_0 - Wse \tag{37}$$

$$Ws_N = Wss + Wsr \tag{38}$$

$$X_0 = \frac{Wse \ Xe + Wsr \ Xr}{Ws_0} \tag{39}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$Ts_N = \frac{Wse\ Cpse\ Te + Wsr\ Cpsr\ Tr}{Ws_0\ Cps_0} \tag{40}$$

donde los *X* son las concentraciones de sal en las respectivas corrientes y los *Cp* son las capacidades caloríficas.

Cada controlador *P+I* puede modelarse de acuerdo a las siguientes expresiones generales:

$$Ey = yS - y \tag{41}$$

$$Ay = A0y - Ky\ (\ Ey + \frac{1}{\theta y}\ AIy\ ) \tag{42}$$

donde *Ey* es el error de la variable controlada *y* con respecto al *set point yS*, *Ay* es la salida del controlador y es equivalente a la apertura de la válvula de control (está limitada al intervalo [0,1]), *A0y* es la apertura inicial, *θy* es la constante de tiempo del efecto integral, *Ky* es la ganancia del controlador y *AIy* es el efecto integral. Esta última variable da origen a una de las ecuaciones diferenciales planteada anteriormente.

Las válvulas se pueden modelar utilizando la siguiente expresión general:

$$Wy = Cvy\ \alpha y^{(\ Ay - 1\ )}\ \sqrt{\rho y\ \Delta Py} \tag{43}$$

donde *Cvy* y *αy* son parámetros de la válvula, *Ay* es la salida del controlador que la gobierna, *ρy* es la densidad del fluido que la atraviesa y *ΔPy* es la diferencia de presión entre sus extremos.

Para modelar las bombas se pueden emplear las mismas ecuaciones utilizadas en el ejemplo del evaporador:

$$Py = \beta y_0 + \beta y_1\ Wy + \beta y_2\ Wy^2 \tag{44}$$

donde los *β* son parámetros de la bomba que dependen de la presión de entrada, diámetro de impulsor y las revoluciones por minuto.

Adicionalmente, un conjunto de correlaciones deben emplearse para estimar las propiedades físico-químicas tales como condiciones de equilibrio (*P* y *Tc*, se supone aplicable la expresión de Antoine, aunque con la presencia de electrolitos, esta suposición debe considerarse según la exactitud que se necesite), calores latentes (*λvs* y *λvsc*), elevación del punto de ebullición (EBP), capacidades caloríficas (*Cps* y *Cpw*),

etc.

XVII.3.3 Resolución del Modelo

La forma de resolver el modelo (la secuencia de resolución) del sistema de ecuaciones diferenciales y el sistema de ecuaciones algebraicas sigue el lineamiento visto en los capítulos anteriores. Al igual que en el capítulo XV, el tamaño del modelo hace que se complique la resolución. En efecto, ahora el sistema de ecuaciones diferenciales está integrado por 50 ecuaciones, mientras que el sistema de ecuaciones algebraicas tiene más de 200 ecuaciones.

Para la solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales se utiliza un sistema explícito (Runge-Kutta de 4to. orden). En cuanto al tiempo de cómputo, el tamaño del sistema de ecuaciones diferenciales afecta directamente al tiempo de resolución pero lo hace en forma lineal. En cambio, el tamaño del sistema de ecuaciones algebraicas afecta exponencialmente al tiempo de cálculo. Por lo tanto, es necesario manipular este sistema previamente a fin de reducir el costo computacional. Esto puede hacerse mediante adecuadas simplificaciones y/o el empleo de técnicas de ordenamiento como las vistas en el Capítulo IV para evitar procedimientos iterativos. Se deja al lector el análisis de la metodología de resolución dadas las condiciones iniciales.

Tabla XVII.1: Estado estacionario inicial.

j	X x 100	T [° C]	Pc x 10 [Kg/cm^2]	Ts [° C]	Ws x 10^{-4} [Kg/h]
1	4.56	72.4	3.41	67.9	2.04
2	4.59	67.9	2.80	63.3	2.03
3	4.62	63.4	2.30	58.8	2.01
4	4.65	58.8	1.85	54.2	2.00
5	4.69	54.3	1.49	49.5	1.98
6	4.72	49.8	1.19	44.9	1.97
7	4.75	45.4	0.94	40.3	1.96
8	4.78	41.1	0.75	35.6	1.94
9	4.81	36.8	0.59	31.1	1.93
10	4.86	30.4	0.38	26.5	1.91

T_0 [°C]	X_0	W_{so} [Kg/h]	W_{sr} [Kg/h]	W_{ss} [Kg/h]	Wc_{10} [Kg/h]	W_{se} [Kg/h]
77	$4.64 x 10^{-2}$	$2.05 x 10^4$	15420	3720	1472	5140

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

La Tabla (XVII.1) muestra el estado estacionario determinado por el simulador para el desalador. Sin embargo, al igual que en el caso del evaporador de propano, las aplicaciones más interesantes son aquellas que involucran simulación dinámica.

Las Figuras (XVII.10) a (XVII.12) muestran la evolución de las variables más importantes cuando se simula una disminución en el *set point* del calentador principal. A pesar de que la perturbación es simulada mediante una función escalón en T_{0S}, T_0 decrece lentamente (Figura (XVII.10)). Más exactamente, T_0 cae bruscamente desde *77 °C* a *68 ºC*, igualando a la temperatura Ts_1, debido a que el escalón en T_{0S} provoca que el controlador cierre el paso de vapor al calentador. El lento descenso que se observa posteriormente se debe a que la disminución de la temperatura en el primer evaporador provoca una disminución en la evaporación; esto significa menor precalentamiento de la alimentación y menor Ts_1, lo que origina una nueva disminución de temperatura en el primer evaporador. Este mismo proceso se repite en todas las otras etapas.

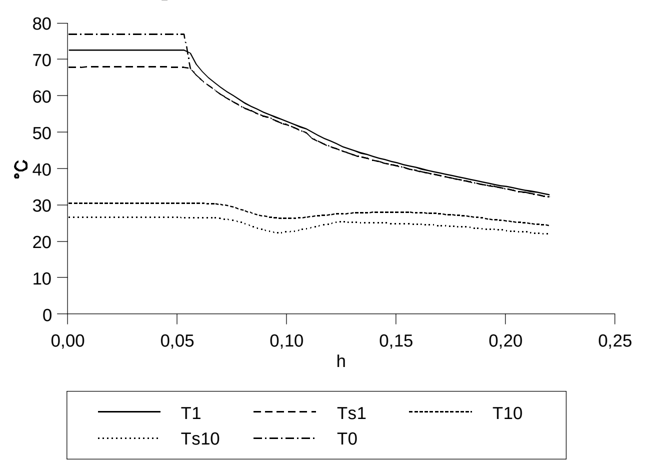


Figura XVII.10: Respuestas a la disminución de T0S.

De una manera similar se puede explicar la evolución de las presiones (ver Figura (XVII.11)). La disminución de la temperatura, provoca la disminución de la presión. De esta forma, la perturbación introducida en el control de temperatura también afecta a las presiones.

En cuanto al nivel del líquido (ver Figura (XVII.11)), puede notarse que L_1 aumenta inicialmente debido a la disminución en la evaporación, pero el controlador de nivel actúa sobre Ws_1 (ver Figura (XVII.12)) para que L_1 recupere finalmente su valor original. Algo parecido ocurre con niveles de las otras etapas, donde los controladores actúan sobre los respectivos caudales provocando grandes

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999


perturbaciones (ver Figura (XVII.12)).

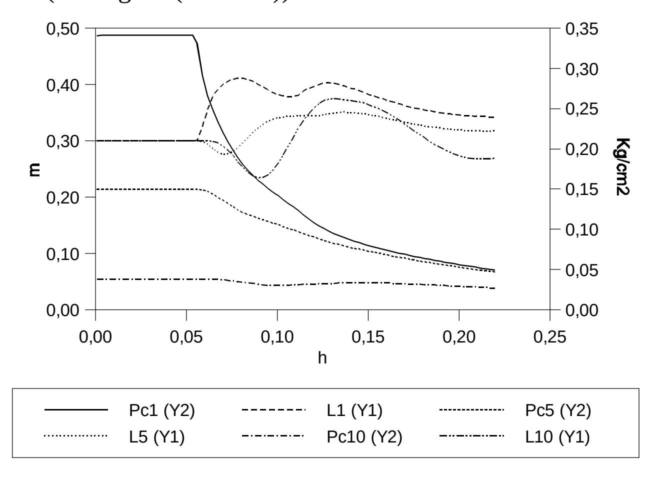


Figura XVII.11: Respuestas a la disminución de *T0S*.

Note cómo una perturbación que inicialmente afectaba a las temperaturas, terminó afectando seriamente a los caudales. Situaciones similares son frecuentes en las plantas modernas, donde todas las etapas están altamente integradas y controladas. Ahora, trate de comprender el esfuerzo que debe realizar el operador para determinar a partir de la evolución de las variables (Figuras (XVII.10 - 12)) qué cosa está funcionando mal en el proceso. En otras palabras, el operador debe identificar la falla que está afectando a la planta a partir de la evolución de las variables, en este caso: un *set point* erróneo.

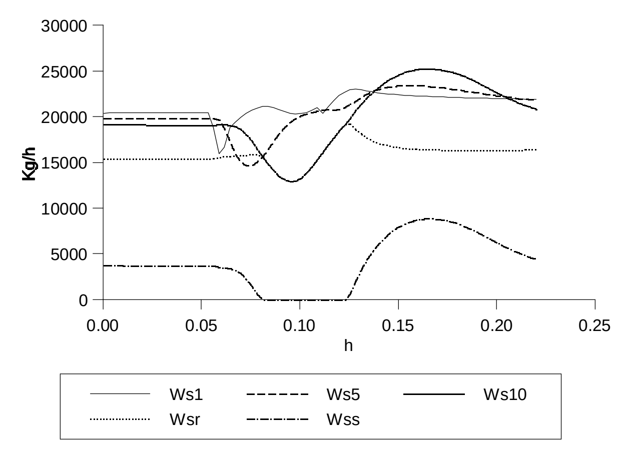


Figura XVII.12: Respuestas a la disminución de T0S.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En realidad, la situación es más compleja aún ya que en los casos reales las lecturas están afectadas por ruidos, el operador enfrenta situaciones para la cual no fue entrenado, está sometido a una situación de alto *stress*, numerosas alarmas pueden activarse simultáneamente, etc. Por todo esto, es necesario contar con herramientas para entrenar a los operadores y otras que le brinden apoyo durante las situaciones de emergencia. Los simuladores dinámicos son excelentes herramientas para el entrenamiento, siendo sólo superados por los simuladores de tiempo real que se verán en el Capítulo XXI. En cambio, como herramienta de apoyo al operador para superar situaciones de emergencia se están desarrollando los sistemas de diagnóstico (Tarifa, 1995). Estos sistemas procesan las lecturas obtenidas de la planta para identificar las fallas que posiblemente están afectando al proceso. Esto es una gran ayuda, ya que si bien el operador continúa siendo el responsable de la identificación de la falla, puede ahora concentrarse sobre el grupo limitado sugerido por el sistema de diagnóstico.

XVII. 4 REACTOR PRODUCTOR DE SULFOLENO

XVII.4.1 Descripción del Proceso

El proceso a simular en esta sección es el reactor batch productor de sulfoleno que se muestra en la Figura (XVII.13) (Tarifa, 1995):

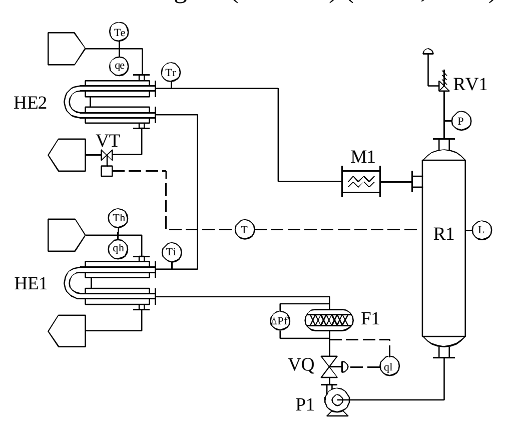


Figura XVII.13: Reactor productor de sulfoleno.

Este proceso es una etapa intermedia en la producción de sulfolano. En efecto, para obtener sulfoleno primero se realiza una reacción de adición que produce sulfolano; luego, el sulfoleno es hidrogenado para obtener el producto final. La reacción de adición es fuertemente exotérmica:

$$SO_2 + C_4H_6 \rightleftarrows Sulfoleno \qquad (45)$$

Como se observa, se combina un mol de anhídrido sulfuroso con un mol de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

butadieno para producir un mol de sulfoleno. La reacción es en fase líquida y el dióxido se encuentra en exceso.

Al ser un proceso batch, las condiciones del proceso no se mantienen constantes durante la operación normal. Es más, la estructura misma del proceso (topología) también puede cambiar.

La Figura (XVII.14) muestra la evolución de la temperatura durante un ciclo completo desarrollado en forma normal.

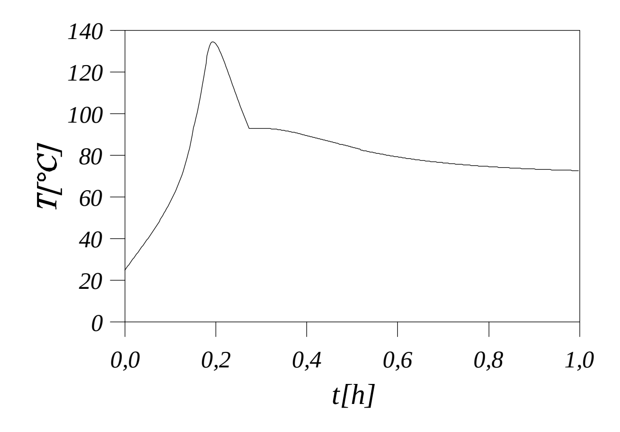


Figura XVII.14: Evolución normal de la temperatura.

Los reactivos están inicialmente a *25°C*. El dióxido se encuentra en un exceso de 4:1 con respecto al butadieno. A esta temperatura la velocidad de la reacción es despreciable, por lo tanto es necesario que toda la mezcla sea recirculada a través del calentador *HE1*. Este calentador tiene la misión de encender la reacción. El mismo recibe agua a una temperatura fijada en *70°C*. Una vez que la reacción se inicia, el calor producido por la misma es suficiente para continuar calentando la mezcla. De esta manera la temperatura se eleva rápidamente hasta superar los *70°C* del agua suministrada al equipo *HE1*. A partir de ese momento dicho equipo se comporta como un enfriador de la mezcla.

La reacción es tan exotérmica que es necesario agregar un enfriador adicional para evitar la destrucción del reactor. Este enfriador es el equipo *HE2* que es habilitado por el sistema de control de temperatura cuando la misma supera los *93°C* (esto es un cambio en la topología del proceso). El *HE2* recibe agua de enfriamiento a *25°C*. De esta manera se atenúa la reacción hasta que la misma comienza a apagarse. A partir de ese momento la temperatura desciende. Cuando la misma está por debajo de *83°C*, el controlador de temperatura procede a retirar de servicio el enfriador *HE2*, mientras el *HE1* sigue habilitado. Se permite que la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

temperatura descienda para lograr el mayor grado de conversión posible pero se evita que sea inferior a *70°C* porque el producto puede solidificar.

XVII.4.2 Construcción del Modelo

Al igual que en las secciones anteriores, se optó por un modelo global orientado a ecuaciones. Aunque ahora se está modelando un proceso *batch*, el modelo a plantear también consiste en un sistema de ecuaciones algebraicas y un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden.

Al plantear el balance de materia para cada componente *i* en la fase vapor del reactor, surge la siguiente ecuación:

$$\frac{dMv_i}{dt} = qv_i \qquad (46)$$

donde Mv_i es el *holdup* de vapor del compuesto *i*, mientras que qv_i es el flujo de componente *i* desde el líquido hacia el vapor.

El balance para la fase líquida es:

$$\frac{dMl_i}{dt} = qr\ Cr_i - ql\ C_i + \gamma_i\ RE - qv_i \qquad (47)$$

donde Ml_i es el *holdup* líquido del compuesto *i*, γ_i es el coeficiente estequeométrico, *RE* es la velocidad de reacción, *ql* es el caudal líquido de salida, *qr* es el caudal de entrada, C_i es la concentración del compuesto *i* en la corriente de salida, mientras Cr_i lo es en la entrada.

En el balance de energía, se asume que la variación de energía en la fase vapor es despreciable, mientras que en la fase líquida se plantea:

$$Cpl\ Mtl\ \frac{dT}{dt} = qr\ \rho r\ (Cpr\ Tr - Cpl\ T) - \Delta H\ RE - \sum qv_i\ \lambda v_i \qquad (48)$$

donde los *Cp* son las capacidades caloríficas en las distintas corrientes, *Mtl* es la masa líquida, ρr es la densidad del líquido en la corriente de entrada, λv_i es el calor de evaporación del compuesto *i*, las *T* son las temperaturas en las distintas corrientes, y ΔH es el calor producido por la reacción.

Finalmente, se agrega una ecuación más para simular la acción integral *AIq* del controlador del caudal de recirculación:

$$\frac{dAIq}{dt} = \xi q \qquad (49)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde ξq es la diferencia entre el valor deseado y el medido para el caudal de recirculación.

Por otra parte, entre las ecuaciones algebraicas se puede citar la empleada para calcular la elevación de presión ΔPt producida por la bomba de recirculación:

$$\Delta Pt = \beta_0 + \beta_1 \, ql + \beta_2 \, ql^2; \qquad (50)$$

donde los β son coeficientes que dependen de la presión de entrada, del diámetro del impulsor y de las revoluciones por minuto.

El controlador del caudal de recirculación es modelado con:

$$Aq = 0.5 + Kq \, (\xi q + \frac{1}{\theta q} \, AIq) \qquad (51)$$

$$\xi q = qls - ql \qquad (52)$$

donde Aq es la salida del controlador y es equivalente a la apertura de la válvula de control. Kq y θq son parámetros del controlador. ξq es el error y qls es el *set point*.

El controlador de temperatura es del tipo *on-off* y su modelo es:

$$AT_n = \begin{cases} 100\% & si \ T > 93ºC \\ 0\% & si \ T < 83ºC \\ AT_{n-1} & si \ 83ºC \leq T \leq 93ºC \end{cases} \qquad (53)$$

$$AT_0 = 0\%$$

donde AT_n es la salida del controlador y equivale a la apertura de la válvula de control. Como puede observarse, la salida del controlador no sólo depende de la variable controlada sino que depende también de la salida anterior o estado del controlador.

La caída de presión en el filtro está dada por:

$$\Delta Pf = \left(\frac{ql}{Cqf} \right)^2 \rho l \qquad (54)$$

donde Cqf es la capacidad del filtro.

La válvula de control es modelada con:

$$ql = Cqv \ \alpha q^{Aq - 1} \sqrt{\frac{\Delta Pv}{\rho l}} \qquad (55)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde *Cqv* y *αq* son parámetros de la válvula.

La cinética está dada por las siguientes ecuaciones que contemplan dependencia de las concentraciones y la temperatura:

$$K_i = A_i \, e^{-\frac{E_i}{R\,T}} \tag{56}$$

$$RE = Vl \, (K_1 \, CA \, CB - K_2 \, CC) \tag{57}$$

donde *CA*, *CB* y *CC* son las concentraciones molares del dióxido de azufre, del butadieno y del sulfoleno respectivamente. *Vl* es el volumen del líquido. Los K_i son las constantes cinéticas. Los E_i y los A_i son parámetros de las reacciones. *R* es la constante de los gases.

La presión en la campana se calcula usando gases ideales:

$$P = \frac{R \, Mtv \, T}{Vv} \tag{58}$$

donde *Vv* es el volumen de la campana, y *Mtv* es la cantidad total de moles de vapor.

La velocidad de evaporación del compuesto *i* es calculada como:

$$qv_i = Kt_i \, (x_i \, Pv_i - y_i \, P) \tag{59}$$

donde Kt_i es el coeficiente global de transferencia de materia para el compuesto *i*, x_i es la fracción molar del compuesto *i* en la fase líquida, y_i es la fracción molar del compuesto *i* en la fase vapor, y Pv_i es la presión de vapor del compuesto *i* puro a la temperatura T.

Para el calentador *HE1* se plantean las siguientes ecuaciones:

$$Q_{HE1} = ql \, \rho l \, Cpl \, (Ti - T) \tag{60}$$

$$Q_{HE1} = qh \, \rho h \, Cph \, (Th - Ths) \tag{61}$$

$$Q_{HE1} = UAh \, \Delta Tm \tag{62}$$

$$\Delta Tm = \frac{(Ths - T) + (Th - Ti)}{2} \tag{63}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Para el enfriador *HE2* se plantea un conjunto similar de ecuaciones.

Al igual que en las secciones anteriores, el sistema de ecuaciones algebraicas se completa con correlaciones, relaciones geométricas, balances estacionarios en equipos menores, etc.

XVII.4.3 Resolución del Modelo

A pesar de tratarse de un proceso *batch*, la resolución del modelo se hace aplicando las técnicas ya descriptas en capítulos anteriores para procesos continuos. Las diferencias están en el estado inicial y en las funciones de control. Cuando se simula un transitorio entre diferentes estados estacionarios, el estado inicial que se adopta es precisamente el estado estacionario correspondiente al punto de partida (por ejemplo, la operación normal del proceso). En cambio, cuando se simula un proceso *batch*, se adopta el estado inicial del proceso como el estado en el cual éste debe comenzar a procesar los materiales objeto de la transformación especificada. Ya sea por el estado mismo del proceso o por las acciones de los controladores o de los operarios; el estado inicial no es un estado estacionario. Entonces, el proceso comenzará a evolucionar. Por lo tanto, durante la operación normal de un proceso *batch* no se tiene un *estado estacionario normal*, sino que se tiene una *evolución normal* o deseada. Además, existe una gran diferencia al simular procesos *batch* completos o *equipos batch*. Todos estos puntos serán analizados en el Capítulo XIX.

A lo largo de la evolución normal, los controladores o los operarios pueden introducir cambios en la topología y en las condiciones de operación de la planta. Todo esto debe ser contemplado por el simulador.

Con el simulador es posible encontrar la evolución normal de un proceso dado. En el caso del reactor, la evolución normal de la temperatura mostrada en la Figura (XVII.14) fue obtenida con el modelo analizado. En la Figura (XVII.15) se presenta la evolución de las concentraciones durante la operación normal obtenidas también con el simulador.

Para terminar, los operadores que supervisan un proceso batch deben enfrentar el problema que representa la constante evolución de las variables. Ahora no sólo es un problema identificar una falla a partir de las lecturas anormales, sino que también es un problema determinar cuáles son las lecturas anormales. En efecto, en un proceso estacionario basta con observar qué variables cambian de valor; pero en un proceso batch, todas las variables cambian de valor durante la operación normal. Por lo tanto, el operador deberá estar suficientemente entrenado (o asistido) para poder discriminar entre cambios normales y cambios anormales de las variables.

Nuevamente, la simulación dinámica y la de tiempo real son excelentes herramientas para el entrenamiento (ver Capítulo XXI), y un sistema de diagnóstico se vuelve imprescindible (Tarifa, 1995).

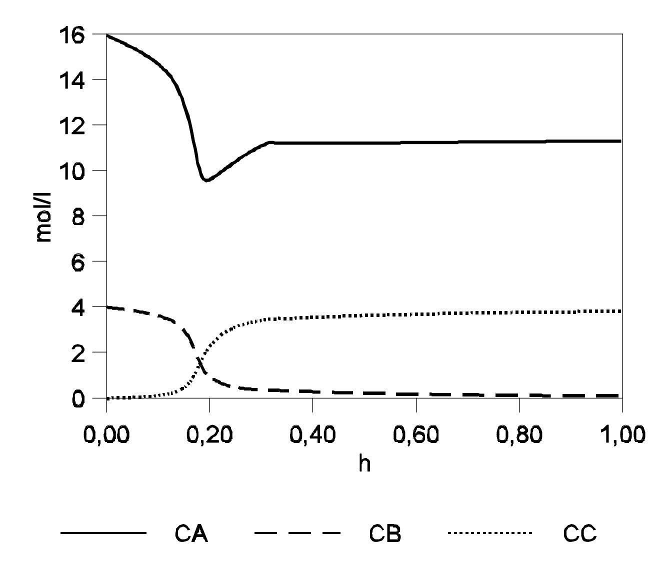


Figura XVII.15: Evolución normal de las concentraciones.

Concluyendo, en este capítulo se presentó el desarrollo de modelos para tres casos distintos de procesos químicos. La importancia de la simulación dinámica para el diseño de plantas y el entrenamiento de operadores fue destacada a través de varios ejemplos. Estos ejemplos sugieren la necesidad de contar con sistemas de diagnóstico que asistan al operador en situaciones de emergencia. Finalmente, se mencionó la importancia de los simuladores de tiempo real. Estos simuladores serán objeto de estudio del Capítulo XXI.

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Tarifa, E.E., Diagnosis de Fallas en Plantas Químicas Complejas: Plantas de Grandes Dimensiones y Procesos Batch, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina (1995).
- Tarifa, E.E., D. Humana , G. Vázquez, S. Franco y N. J. Scenna, Simulación Dinámica en Tiempo Real. Pasteurizador HTST, *UNJu* (1997).

CAPÍTULO XVIII

MODELADO DEL PROCESO DE DIGESTIÓN ANAERÓBICA EN REACTORES SIMPLES

Por
Miguel Mussati, Pio Aguirre y Nicolás Scenna

XVIII.1 INTRODUCCIÓN

El proceso de digestión anaeróbica es un proceso biológico natural en el que una comunidad entrelazada de bacterias cooperan para formar una fermentación estable, autorregulada, que convierte materia orgánica residual en una mezcla de metano y dióxido de carbono.

El residuo a tratar, que provee el carbono y la energía necesarios para los procesos biológicos, puede provenir de las más diversas fuentes (domiciliarios, de la industria alimenticia y papelera, residuos de la actividad ganadera, etc.) con las consiguientes diferencias en composición. La naturaleza del residuo dictará qué etapas serán las controlantes del proceso total y determinará los puntos de regulación más importantes. Determinados residuos (por ejemplo, estiércol) poseen un elevado contenido de nitrógeno orgánico, por lo que son de importancia los efectos inhibitorios del amoníaco libre sobre el crecimiento de las bacterias metanogénicas.

Algunos residuos se presentan bajo la forma de sólidos suspendidos, mientras que otros lo hacen al estado de solución. A pesar de las variadas formas en que se puede presentar el residuo crudo es posible abordar esta problemática, bajo ciertas hipótesis, en forma general: un sustrato con una composición representativa parametrizada según su naturaleza u origen, que se degrada según todas las etapas del proceso de digestión anaeróbica (hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis, metanogénesis). Por lo tanto, un modelo de reactor que involucre el proceso de degradación anaeróbica debe considerar: el aspecto biológico (estado fisiológico), los fenómenos de transferencia entre las fases presentes en el sistema (gas, líquido y, si hay microorganismos soportados, sólido), el equilibrio iónico de las especies y, por último, la geometría del sistema.

Microorganismos que participan en la degradación anaeróbica de la glucosa

La degradación anaeróbica del material orgánico se lleva a cabo por una población mixta de microorganismos. En el proceso de degradación de la glucosa están involucrados cuatro grupos de bacterias, a saber: bacterias formadoras de ácidos o *acidogénicas*, de crecimiento muy rápido (tiempo de duplicación mínimo de 30 minutos) que utilizan la glucosa para producir una mezcla de ácido acético, propiónico

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

y butírico. La reacción preferida por estas bacterias es la que conduce a ácido acético. Las otras reacciones son las respuestas de las bacterias a la acumulación de hidrógeno durante las perturbaciones de carga al sistema.

Las bacterias *acetogénicas* convierten ácido propiónico y butírico en ácido acético. Tienen crecimiento relativamente lento (tiempo de duplicación mínimo de 1.5 a 4 días -Lawrence y McCarty,1969-). Las reacciones que producen son muy dificultosas energéticamente y se interrumpen fácilmente por acumulación de gas hidrógeno disuelto en el medio (McInerney, 1971; Heyes y Hall, 1981).

Dentro de las bacterias metanogénicas, las denominadas *acetoclásticas* convierten ácido acético en dióxido de carbono y metano. Se desarrollan muy lentamente (tiempo de duplicación mínimo de 2-3 días) e influyen apreciablemente en el pH del sistema por eliminación de ácido acético y formación de dióxido de carbono. Son responsables de la mayoría del metano producido**.**

Las bacterias *metanogénicas que utilizan hidrógeno* son el "basurero" del hidrógeno. Se desarrollan rápidamente (tiempo de duplicación mínimo de 6 horas). Controlan el potencial redox del proceso. Las trazas de hidrógeno que quedan en el medio regulan la velocidad total de producción de ácidos por las bacterias acidogénicas, y la composición de la mezcla formada. El hidrógeno también controla la velocidad a la cual los ácidos propiónico y butírico son convertidos a ácido acético; en definitiva, regulan la formación de ácidos volátiles.

En la Fig. 1 se pueden apreciar las relaciones entre las diversas reacciones y, por lo tanto, entre las distintas especies biológicas que intervienen en el proceso de degradación anaeróbica de un sustrato “simple”, en este caso glucosa (Mosey, 1983). Sin entrar en demasiados detalles biológicos, A, B....F constituyen sitios de regulación en los que intervienen las formas reducida y oxidada de la molécula transportadora nicotinamida-adenindinuleótido (NAD). La relación entre ambas formas determinará la velocidad de toma del “intermediario” en cada sitio de regulación. El hidrógeno juega un papel importante en tal regulación.

Cabe acotar que el esquema no deja de ser un modelo que pretende representar aproximadamente los mecanismos reales de la degradación anaeróbica.

Relaciones estequiométricas

Si se pretende representar la evolución más “completa” de la degradación anaeróbica, resulta necesario incluir la formación de biomasa y las reacciones que involucran al nitrógeno. La estequiometría básica ha sido estudiada por varios autores, entre los cuales pueden citarse a Wolfe (1979) y Smith (1980), quienes se basaron en la fórmula empírica para la biomasa (microorganismos) $C_5H_7O_2N$, determinada por Loehr (1974).

Por otra parte, Hill y Barth (1974) realizaron análisis en residuos de cerdos para determinar su composición química empírica, obteniendo la fórmula $C_6H_{13}NO_5$. Análisis similares efectuados en suero de lechería, carne y residuos de aves permitieron concluir que solamente cambian las relaciones nitrógeno/oxígeno, ya que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

las relaciones carbono/hidrógeno son similares. Esto sugiere la posibilidad de representar la composición de cualquier material orgánico a degradar mediante una fórmula general paramétrica. Estos parámetros pueden obtenerse fácilmente de análisis de laboratorio.

Cinética de las transformaciones microbianas

Crecimiento

Obviamente, para modelar un proceso donde intervienen reacciones químicas resulta necesario utilizar la teoría de reactores y cinética química. Sin demasiados detalles, se presentan a continuación las ecuaciones cinéticas aplicables al esquema de reacciones de la Fig. 1.

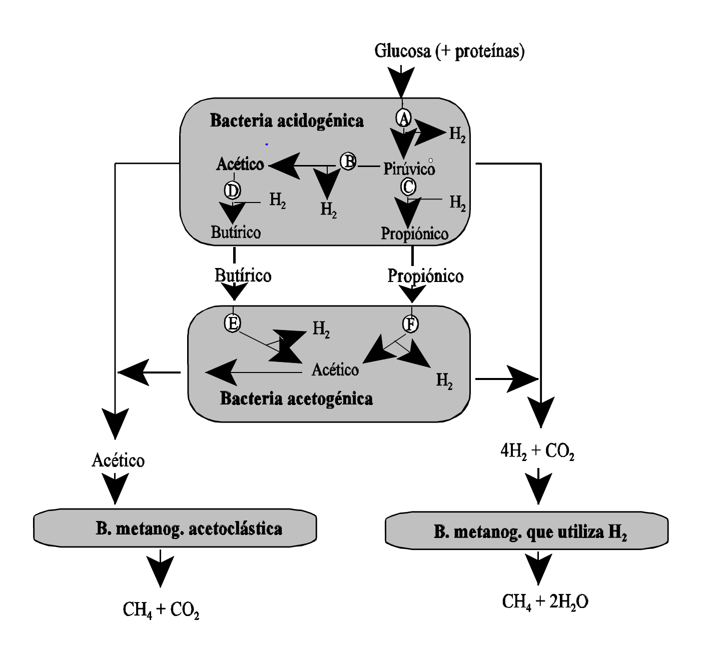


Figura XVIII.1 Representación del proceso de degradación anaeróbica a partir de glucosa

Crecimiento exponencial

La ecuación cinética propuesta para describir el crecimiento de microorganismos es:

$$r_X = \mu X \tag{1}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde r_X es la velocidad de crecimiento expresada en gramos por litro por día, μ es la velocidad específica de crecimiento en día^{-1}, y X es la concentración de biomasa, en gramos por litro.

Si bien μ está influenciada por muchas variables ambientales (temperatura, pH, fuerza iónica, concentración de sustancias inhibitorias), la más importante es la concentración del nutriente limitante: el sustrato. Así:

$$\mu = f(S, T, pH, S_{N_1}, S_{N_2}, ...S_{N_n}) \tag{2}$$

siendo S_{ni} la concentración de un componente limitante del crecimiento genérico, expresada en moles por litro.

La ecuación de saturación de velocidad de Monod

La expresión más usada para describir la velocidad específica de crecimiento *μ* como función de la concentración del nutriente limitante (sustrato) es la atribuida a Monod (1942, 1949), que describe una hipérbola rectangular:

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \tag{3}$$

donde K_s es la constante de saturación de velocidad y S es la concentración de sustrato; ambas en moles por litro de medio.

La expresión puede ser considerada como la “combinación” de dos expresiones que describen el comportamiento a muy bajas y muy altas concentraciones:

$$\mu = \mu_{max} \qquad para\ S \gg K_s \tag{4}$$

$$\mu = \frac{\mu_{max}}{K_s} S \qquad para\ S \ll K_s \tag{5}$$

La misma ecuación se utiliza para describir la cinética enzimática (Michaelis y Menten, 1913) y el fenómeno de adsorción (Langmuir, 1918). Todos estos procesos se caracterizan por tener centros activos que se saturan a altas concentraciones.

Sin embargo, tal ecuación no tiene en cuenta los efectos inhibitorios que tienen lugar en las fermentaciones anaeróbicas. Se propusieron distintas formas para la función de inhibición. Hill y Barth (1977) introdujeron el modelo de inhibición

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

propuesto por Haldane:

$$\mu = \mu_{max} \frac{1}{1 + \frac{K_s}{S} + \frac{I}{K_i}} \tag{6}$$

donde K_i es la constante de inhibición e *I* es la concentración del inhibidor; ambas en moles por litro.

Otra expresión para la inhibición encontrada en la literatura (que se adopta en este capítulo) es la inhibición tipo no-competitiva (Ierusalimsky, 1967):

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \frac{K_i}{K_i + I} \tag{7}$$

Se observa en (6) y (7) que a medida que aumenta *I* la velocidad de crecimiento específica disminuye.

En muchos sistemas microbianos, el sustrato puede no estar disuelto (*sustrato particulado*). Ejemplos de tales sistemas son aguas naturales, aguas residuales municipales y fermentaciones industriales que utilizan almidón, celulosa, hidrocarburos, etc. Las ecuaciones presentadas sólo han sido probadas rigurosamente con sustratos disueltos. Indudablemente, la interacción temporal y espacial entre el sustrato particulado y los microorganismos jugará un papel fundamental en la determinación de la velocidad y extensión de la degradación y, por tanto, en el crecimiento de organismos sobre el sustrato. Una expresión de saturación de crecimiento puede resultar adecuada aún con sustratos particulados, pero el nivel de saturación puede reflejar una limitación de área superficial, contraria a una limitación de nutrientes.

En ciertos casos resultará necesario incorporar una cinética de hidrólisis del material particulado, como etapa previa a la degradación del material soluble.

Mantenimiento y metabolismo endógeno

Mantenimiento

Los microorganismos requieren energía para mantener las estructuras existentes y para los procesos tales como movilidad (el “costo de vida”).

El mantenimiento representa, cuantitativamente, la masa de sustrato oxidada por unidad de masa celular y por unidad de tiempo, que suministra la energía necesaria. El mantenimiento disminuye el rendimiento total (u observado) de células a partir del sustrato. Su expresión es:

$$r_m = k_m X \tag{8}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

siendo k_m el coeficiente de mantenimiento expresado en moles de sustrato por gramo de biomasa por día, y X es la concentración de biomasa en gramos por litro.

Metabolismo endógeno

Un rendimiento celular observado menor al rendimiento teórico se debe al metabolismo endógeno; esto es, la degradación de componentes celulares.

El metabolismo endógeno juega un papel importante en la supervivencia de los microorganismos; por ejemplo, en un biofilm con sustrato agotado. El término de metabolismo endógeno se incluye en el balance de materia de la biomasa, y esencialmente refleja el decaimiento de la biomasa. Su expresión es:

$$r_E = k_E \; X \qquad (9)$$

donde k_E es el coeficiente de metabolismo endógeno expresado en $día^{-1}$.

Muerte de microorganismos

La cinética de muerte debido al agotamiento del sustrato se considera de primer orden con respecto a la concentración celular:

$$r_D = k_D \; X \qquad (10)$$

k_D es el coeficiente de muerte específico; al igual que las velocidades de crecimiento específicas, se expresan en t^{-1} ($día^{-1}$).

XVIII.2 MODELADO DE LOS PROCESOS FUNDAMENTALES EN REACTORES BIOLÓGICOS SIMPLES

XVIII.2.1 *Evolución histórica*

Debido a la complejidad del proceso de degradación anaeróbica es difícil desarrollar un modelo matemático que refleje la “realidad biológica”, por lo que los modelos descriptos en la literatura son sólo simplificaciones de aquélla.

El modelado y la simulación se constituyen en herramientas útiles para el diseño y para evaluar, por ejemplo, la performance en estado transiente del digestor y las estrategias de control y puesta en marcha a implementar. Además, debido a que la parte experimental es algo dificultosa y tediosa dado los largos tiempos de retención empleados en estos procesos, no se disponen de abundantes datos experimentales, por lo que los estudios de modelado y simulación son ciertamente necesarios y complementarios de aquéllos.

Una estrategia general de modelado involucra los siguientes pasos:

a.- modelar el proceso de degradación anaeróbica del sustrato complejo, los fenómenos de transporte y cinéticos-difusivos subyacentes;

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

b.- integrar los mismos en un reactor ideal (tanque agitado ideal, flujo pistón, etc.);
c.- considerar no-idealidades del patrón de flujo, geometría del sistema y fluidodinámica para modelar distintos tipos de reactores reales (lecho fijo, lecho fluidizado, mantos de barro, etc.).

Los primeros modelos que se desarrollaron (Andrews, 1969, 1971; Buhr y Andrews, 1977) contemplaban solamente la velocidad de degradación del ácido acético para describir la velocidad total de la digestión de materia orgánica (se asumió la degradación del ácido acético como etapa limitante).

El desarrollo de modelos matemáticos que describen el procesamiento anaeróbico de residuos animales (ejemplo que se analizará en este capítulo) comenzó en los primeros años de la década del ‘70 debido a la necesidad ecológica de tratar estos residuos en países de Europa Central. Entre los primeros trabajos realizados se encuentran los de Hill y Barth (1977), que incluyen modelos para la digestión de residuos de cerdos. En estos modelos se incorporan las etapas de hidrólisis y acidogénesis para computar el efecto de sobrecarga orgánica (acumulación de ácidos grasos volátiles) en la velocidad de metanización. Varios investigadores introdujeron en sus trabajos el modelo de inhibición de Haldane, cuya expresión cinética se presentó en secciones anteriores (ec. 6). Dado que tal expresión tuvo su origen en la ecuación de Monod permite estimar puntos óptimos de operación del reactor y prever condiciones operativas desfavorables.

Boekhorst *et al.* (1981) afirman que los digestores anaeróbicos que utilizan residuos animales raramente operan en un verdadero estado estacionario, son estados cuasi-estacionarios. Por tanto, es el modelo dinámico el que posee la capacidad de predecir la respuesta del estado cuasi-estacionario y permite la optimización del proceso y un mejor diseño.

Angelidaki *et al.* (1993) presentan un modelo matemático para la degradación anaeróbica de material orgánico complejo (estiércol), al igual que Hill (1982), pero con ciertas mejoras. El modelo incluye una etapa de hidrólisis enzimática y cuatro etapas biológicas, involucrando doce compuestos químicos. El amoníaco disuelto y el ácido acético constituyen los principales factores reguladores del modelo. En adelante se utilizará el esquema de degradación anaeróbica que presentaran estos autores para modelar el reactor tanque agitado continuo de mezcla perfecta con crecimiento suspendido. Posteriormente, se considerarán otros aspectos, tales como flujo no ideal, crecimiento soportado (biofilm) y distintas configuraciones de reactor real, a los efectos de presentar un panorama genérico de la problemática del modelado y simulación de este tipo de procesos.

XVIII.2.2 *Modelado de un biodigestor anaeróbico tanque agitado ideal con microorganismos suspendidos*

Hipótesis consideradas

Las hipótesis consideradas para desarrollar el modelo dinámico del biorreactor son las siguientes:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- El residuo -estiércol- consiste en una mezcla compleja de materia orgánica disuelta y no disuelta, además de compuestos inorgánicos, que en el modelo se representan como unidades de hidratos de carbono solubles (s) e insolubles (is), con fórmula básica $(C_6H_{10}O_5)_S$ y $(C_6H_{10}O_5.n\,NH_3)_{is}$, respectivamente. La fracción insoluble incluye nitrógeno orgánico ligado, una parte del cual se libera durante la hidrólisis. La composición elemental del sustrato corresponde al análisis empírico de estiércol de cerdo crudo reportado por Hill y Barth (1974), excepto que se permite la variación de la cantidad de amoníaco. El residuo puede contener, además, iones amonio, fosfatos, otros cationes y aniones, compuestos intermedios (acetato, propionato, butirato), y dióxido de carbono disuelto. El residuo, así considerado, se aproxima a un "residuo generalizado".

- Presión constante en la fase gaseosa.

- Volumen de reacción y temperatura constantes.

- Para el cálculo del pH se consideran todas las especies iónicas presentes en el equilibrio y se incorporan los balances de nitrógeno y de cationes y aniones. Además se tienen en cuenta los efectos de la transferencia líquido-gas del dióxido de carbono. Se considera insolubilidad del metano en el medio y no se incluye la transferencia líquido-gas del amoníaco.

- La fracción orgánica insoluble se convierte a materia orgánica soluble por las enzimas extracelulares de las bacterias acidogénicas con una cinética de primer orden. La constante de hidrólisis varía con la concentración de los ácidos grasos volátiles (acético, propiónico y butírico).

- Para la estequiometría se supone que la parte orgánica soluble está constituida por un monómero cuya fórmula es $(C_6H_{10}O_5)_s$; en tanto que para la cinética de degradación se le asignan los parámetros correspondientes a la glucosa.

- Se incluye en las constantes fisicoquímicas (constantes de equilibrio y disociación, constantes de Henry, etc.) y en los parámetros biológicos (velocidad específica máxima de crecimiento) la dependencia con la temperatura.

- Se considera la interacción de cuatro especies biológicas activas para representar la población mixta del digestor. No se consideran las bacterias que utilizan hidrógeno (se explicará al tratar la estequiometría). Aquí cabe aclarar que en la Fig. 1 se esquematizó el fenómeno de degradación anaeróbico de un sustrato simple (glucosa), resaltando la importante función que cumple el gas hidrógeno tanto en la velocidad de producción como en la composición de los ácidos formados. Ese tipo de tratamiento es competencia de la fisiología bacteriana. Prácticamente, ninguno de los trabajos propuestos en la literatura utilizan en el modelado del proceso de digestión anaeróbica de sustratos complejos el esquema inhibitorio-regulatorio tal como se presentó, es decir, tratando con la presión parcial de hidrógeno en el gas del digestor y su influencia en los mecanismos internos de las bacterias acidogénicas y acetogénicas. La mayoría de los autores han abordado el modelado tomando en consideración la concentración de los distintos ácidos en el medio y su influencia en la etapa en cuestión a través de constantes de inhibición determinadas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

experimentalmente.

Así, el modelo de inhibición que se considera en las etapas acetogénicas propiónica y butírica es de tipo no-competitivo (Ierusalimsky, 1967) cuya expresión cinética se da en ec. (7); se considera inhibición por ácido acético. No se incluye inhibición en la etapa acidogénica.

- Análogamente, en la etapa metanogénica se considera inhibición por amoníaco libre a través del modelo de inhibición del tipo no competitivo.

- De acuerdo a lo anterior, el "esquema" de regulaciones que considera el modelo es el siguiente:

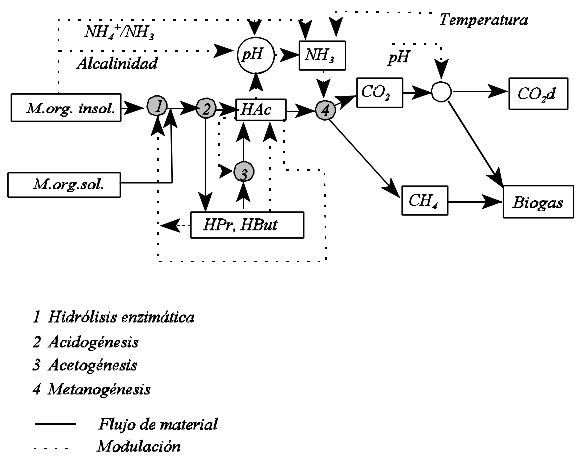


Figura XVIII.2 Esquema inhibitorio del modelo.

El pH del proceso está determinado por la composición de la alimentación (ácidos orgánicos, inorgánicos -fuertes y débiles-, álcalis), por los ácidos grasos volátiles producidos y otros productos de la fermentación como dióxido de carbono. Además de la cantidad que puede entrar con la alimentación, la hidrólisis del material insoluble libera al medio amoníaco, cuya concentración estará determinada por el pH y la temperatura. Esto tiene su importancia debido a que el amoníaco disuelto (NH_3) controla la velocidad de la etapa metanogénica aceticlástica. Como el sustrato en esta etapa es el ácido acético, una inhibición conduce a la acumulación de este ácido. A su vez, la acumulación de ácido acético causa la inhibición por producto de las etapas acetogénicas, resultando una acumulación de ácidos propiónico y butírico. Ahora bien, un aumento de la concentración de ácidos grasos volátiles causa dos efectos: por un lado disminuye la constante de hidrólisis de la etapa hidrolítica del material insoluble por lo que "frena" la producción de más ácidos y, por otro, su acumulación disminuye

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el pH, lo que conduce a una disminución de la inhibición por amoníaco libre debido al desplazamiento del equilibrio NH_3/NH_4^+ hacia el NH_4^+.

Se observa que es un proceso autorregulado, a menos que tenga lugar una perturbación de magnitud tal que exceda la capacidad buffer del medio.

En la Fig. 2 se representa el esquema inhibitorio del modelo.

Estequiometría propuesta

Angelidaki *et al.* (1993) presentaron una "estequiometría parametrizada" para modelar la hidrólisis enzimática del material insoluble.

Por otro lado, estos autores sostienen que la utilización de hidrógeno es comparativamente más rápida respecto a la oxidación del ácido propiónico (y ácido butírico); por esta razón se combina la etapa acetogénica propiónica (y butírica) con la metanogénesis a partir de hidrógeno. La suma de estas dos reacciones "conduce" a la producción de metano a partir de ácido propiónico (y butírico), que no es la situación que se representa en la Fig. 1, donde se incluye la etapa de utilización de hidrógeno separadamente. La suma de estas dos reacciones hace que se pierda información de la dinámica del fenómeno, pero dada la gran diferencia entre ambas velocidades dicha situación no es limitativa en la práctica.

Se considera que el material insoluble proporciona una fracción soluble, una fracción inerte y amoníaco.

El contenido de nitrógeno de la fracción no degradable se representa como amoníaco por simplicidad y es atribuido, fundamentalmente, al contenido de nitrógeno orgánico ligado de tejido vegetal, proteínas, DNA, etc.

La eficiencia enzimática Y_e, los parámetros n y m, junto a la relación de fracción de residuo disuelto a no disuelto, permiten un ajuste relativamente simple del residuo, con cierto significado físico, a varios tipos de estiércol y, por añadidura, a sustratos genéricos.

Se considera para la masa celular la fórmula empírica $C_5H_7O_2N$. A partir del conocimiento de los productos de reacción y de la adopción de tal representación para la biomasa se tiene la siguiente estequiometría (Angelidaki *et al.*, 1993):

Hidrólisis enzimática

$$(C_6H_{10}O_5.nNH_3)_{is} \rightarrow Y_e(C_6H_{10}O_5)_s + (1 - Y_e)(C_6H_{10}O_5.\ mNH_3)_{in} + [n - (1 - Y_e)\ .\ m]\ NH_3$$

Acidogénesis

$$(C_6H_{10}O_5)_s + 0.1115NH_3 \rightarrow 0.1115C_5H_7O_2N + 0.744CH_3COOH + 0.5CH_3CH_2COOH + 0.4409CH_3CH_2CH_2COOH + 0.6909CO_2 + 0.0254H_2O$$

Acetogénesis propiónica

$$CH_3CH_2COOH + 0.06198NH_3 + 0.314H_20 \rightarrow 0.06198C_5H_7O_2N + 0.9345CH_3COOH + 0.6604CH_4 + 0.1607CO_2$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Acetogénesis butírica
$CH_3CH_2CH_2COOH + 0.0653NH_3 + 0.5543CO_2 + 0.8038H_2O \rightarrow 0.0653C_5H_7O_2N + 1.8909CH_3COOH + 0.4452CH_4$

Metanogénesis
$CH_3COOH + 0.022NH_3 \rightarrow 0.022C_5H_7O_2N + 0.945CH_4 + 0.945CO_2 + 0.066H_2O$

XVIII.2.2.1 *Sistema de ecuaciones del modelo*

Como se ha visto en los capítulos anteriores, el sistema de ecuaciones del modelo deberá incluir los balances de masa y energía correspondientes. Ahora bien, como en el presente caso se desprecian los efectos térmicos y se asume control perfecto de temperatura (sistema isotérmico), no se considera el balance de energía. Así, las ecuaciones diferenciales que constituyen el modelo son los balances de masa para cada componente (sustratos primarios e intermedios y otros sistemas como carbonato total, fosfato total, etc.). Junto a estas ecuaciones deben incluirse las expresiones cinéticas, las relaciones físico-químicas, las ecuaciones que describen el comportamiento del reactor, etc.

Según se vió en capítulos anteriores, el balance de materia referido a cualquier reactante (o producto) para un elemento de volumen de reacción es:

$$\begin{gathered}[\textit{velocidad de acumulación del reactante en el elemento de volumen}] = \\ [\textit{velocidad de entrada del reactante al elemento de volumen}] - \\ [\textit{velocidad de salida del reactante del elemento de volumen}] + \\ [\textit{velocidad neta de consumo del reactante en el elemento de volumen}]\end{gathered}$$

Ahora bien, cuando se trata de un reactor tanque agitado continuo de mezcla perfecta la composición del medio reaccionante es la misma en todos los puntos a cada instante, y la composición de la corriente de salida es la misma a la del interior del reactor. Así, el balance escrito para el elemento de volumen es aplicable al reactor “completo”.

El balance para el material orgánico insoluble que sufrirá la hidrólisis enzimática por las bacterias acidogénicas tiene la siguiente expresión:

$$\frac{d}{dt}(VC_{INS}) = Q_o C^o_{INS} - Q_s C_{INS} - V k_{HID} C_{INS} \tag{11}$$

siendo V el volumen de reacción en litros (l), C_{INS} la concentración molar del material insoluble, Q el caudal volumétrico diario (l/d) y k_{HID} la constante de hidrólisis expresada en t^{-1} (d^{-1}). Así, el primer miembro representa los gmol de materia orgánica insoluble acumulada en el reactor por unidad de tiempo (mol/d); los dos primeros términos del segundo miembro representan los gmol de insolubles que ingresan y

salen del reactor, respectivamente, en la unidad de tiempo; mientras que el último sumando son los gmol consumidos en la unidad de tiempo de este material.

De igual manera, para el material soluble se tiene:

$$\frac{d}{dt}(VC_S) = Q_o C_S^o - Q_s C_S + VY_s^{acid} \mu_{acid} X_{acid} + Y_e V k_{HID} C_{INS} \qquad (12)$$

donde C_s representa la concentración molar del material soluble (no se incluyen los ácidos grasos volátiles, ya que, si bien éstos son solubles, se considerarán separadamente), Y_s^{acid} es el coeficiente de rendimiento, o sea los gmol de sustrato consumido por unidad másica de biomasa (gmol/g) de bacterias acidogénicas; este coeficiente es intrínsecamente negativo porque el componente se consume en esta etapa biológica y X_{acid} es la concentración de las bacterias acidogénicas en g/l. Como se mencionó anteriormente, Y_e es la eficiencia enzimática; en tanto que μ es la velocidad específica de crecimiento de las bacterias acidogénicas expresada en $tiempo^{-1}$ (d^{-1}), que tiene la siguiente expresión:

$$\mu_{acid} = \mu_{acid}^{max} \frac{C_{gluc}}{K_s^{gluc} + C_{gluc}} \qquad (13)$$

siendo μ_{acid}^{max} la velocidad específica máxima de crecimiento y K_s^{gluc} la constante de saturación de la glucosa que, tal como se mencionó en el conjunto de hipótesis, se considera representativa de la fracción soluble.

El material orgánico soluble puede tratarse como un sustrato intermedio; es decir, se produce en una de las etapas de degradación y se consume en otra. Otros sustratos intermedios son los ácidos grasos volátiles (acético, propiónico y butírico). Para estos últimos se puede considerar una ecuación de balance general:

$$\frac{d}{dt}(VC_j) = Q_o C_j^o - Q_s C_j + \sum_{k=1}^{k=4} VY_j^k \mu_k (X_k + \xi X_k^f) \qquad (14)$$

Los significados y unidades de C, Q, V, X, Y, μ se han explicitado en párrafos anteriores. El coeficiente de rendimiento Y_j^k puede ser (+), (-) ó (0) si la especie química j se produce, consume o no toma parte en la etapa de degradación k en cuestión. Nótese que se ha incluido en el paréntesis de la ecuación (14) el sumando ξX_k^f. La razón de la introducción de este término se justificará al abordar el modelado de sistemas con crecimiento soportado (biofilm), ya que representa la concentración del grupo bacteriano k en dicho biofilm. La particularización de la ecuación general a sistemas con crecimiento suspendido o soportado se realiza a través de la función

indicadora de existencia de biofilm ξ, que toma el valor 1 ó 0 según si hay o no biofilm presente.

En la ecuación (14) la sumatoria desde k=1 hasta 4 representa la utilización y/o producción total del sustrato intermedio j en el proceso de degradación. El hecho de que en una de las etapas k actúe como "reactivo" o "producto" lo reflejará el signo algebraico de Y_j^k.

Los subíndices y supraíndices introducidos tienen el siguiente significado: *j* hace referencia a una especie química, *k* a una especie biológica y/o la etapa de degradación en la que interviene, *o* y *s* indica entrada y salida, respectivamente, y *f* biofilm.

Finalmente, la velocidad de crecimiento específica para un grupo bacteriano k tiene la siguiente expresión general:

$$\mu_k = \mu_k(\mu_k^{\max},\ K_s,\ C_j^t,\ K_i,\ C_I,\ \psi_{pH}) \tag{15}$$

donde K_i es la constante de inhibición y C_I es la concentración molar del agente inhibidor. El factor ψ_{pH} es una función de inhibición por pH. Como se verá más adelante, los distintos grupos bacterianos tienen pH óptimos de crecimiento, por lo que debe computarse su efecto cuando las condiciones ambientales determinan niveles de concentración de protón alejados de aquellos niveles óptimos. Angelidaki et al. (1993) proponen la siguiente función de inhibición:

$$\psi_{pH} = \frac{1 + 2\ 10^{0.5\ (pK_l - pK_h)}}{1 + 10^{(pH - pK_h)} + 10^{(pK_l - pH)}} \tag{16}$$

siendo pK_l y pK_h los valores de pH para los cuales la velocidad de crecimiento específica μ_k se reduce al 50% de su valor sin inhibición. Obviamente, ψ_{pH} es la unidad cuando el pH del sistema es el óptimo.

A continuación, y a modo de ejemplo, se presenta un caso particular de la ecuación (14): la ecuación de balance para el intermediario ácido acético. El último término corresponde al consumo de este ácido en la etapa metanogénica, mientras que los otros sumandos del paréntesis son los términos de producción correspondientes a las etapas acetogénicas propiónica, butírica y acidogénica, respectivamente.

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\,(VC_{HAc_t}) &= Q_o C_{HAc_t}^{o} - Q_s C_{HAc_t} + \\ V\,(\mu_{prop}\ Y_{acet}^{prop}\ X_{prop} &+ \mu_{but}\ Y_{acet}^{but}\ X_{but} + \mu_{acid}\ Y_{acet}^{acid}\ X_{acid} + \mu_{met}\ Y_{acet}^{met}\ X_{met})\end{aligned} \tag{17}$$

Nótese que la función indicadora de presencia de biofilm toma el valor $\xi = 0$, debido

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

a que solamente se tiene crecimiento suspendido.

Para los demás sustratos intermedios -ácidos propiónico y butírico- las ecuaciones de balance son análogas.

Como es de esperar y se observa en las ecuaciones (14) y (17), el consumo y/o la producción de componentes depende de la concentración X_k de los distintos grupos bacterianos presentes en el medio. Por lo tanto se deben incluir los balances de materia correspondientes a estos grupos. Así, la ecuación de balance para una especie biológica k, considerando la posibilidad de formación de biofilm, es:

$$\frac{d}{dt}(VX_k) = Q_o X_k^o - Q_s X_k + V(\mu_k - u_k)X_k - \xi V(K_{nd} X_k - K_{dd} X_k^f) \qquad (18)$$

donde u_K es el coeficiente de decaimiento para la biomasa suspendida (d^{-1}) y se acepta para todas las especies como el 5% de la velocidad de crecimiento específica máxima; K_{dd} es el coeficiente global de “desprendimiento-decaimiento” de biofilm (d^{-1}) y K_{nd} es el coeficiente de deposición neta (d^{-1}). En el tercer sumando del segundo miembro se han agrupado las velocidades específicas de crecimiento μ_k y de muerte u_k, ya que las velocidades de crecimiento y de muerte (expresadas en g/l d) son de primer orden respecto a la concentración de biomasa. Con el último término se modelan los fenómenos de deposición neta de microorganismos ($K_{nd}X_k$) y desprendimiento-decaimiento ($K_{dd}X_k$). La deposición neta de microorganismos computa la adherencia de éstos al soporte y se representa por una expresión de primer orden en la concentración de bacterias en el líquido; mientras que el desprendimiento-decaimiento es una combinación del fenómeno de muerte de microorganismos que están en el biofilm y el fenómeno de erosión causado por los esfuerzos de corte del líquido sobre el biofilm. En este caso se modela a través de una expresión de primer orden en la concentración de microorganismos en el biofilm. No obstante, dado que aquí se trata la alternativa con microorganismos suspendidos, la función indicadora de presencia de biofilm es ξ=0; así, el último sumando no interviene en la ecuación de balance.

A modo de ejemplo se incluye la ecuación diferencial que determina la dinámica de las bacterias metanogénicas suspendidas. El sustrato de este grupo bacteriano es el ácido acético, cuya ecuación de balance se incluyó anteriormente (ecuación 17) Así, la ecuación (18) se particulariza a la siguiente:

$$\frac{d}{dt}(VX_{met}) = Q_o X_{met}^o - Q_s X_{met} + V(\mu_{met} - u_{met})X_{met} \qquad (19)$$

donde la velocidad de crecimiento específica está dada por:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\mu_{met} = \mu_{met}^{\max} \frac{C_{HAc}^{t}}{K_s^{HAc} + C_{HAc}^{t}} \frac{K_i}{K_i + C_{NH_3}} \psi_{pH} \qquad (20)$$

tomando como base la expresión genérica dada por la ecuación (15). La inclusión del tercer factor en el segundo miembro computa el efecto inhibitorio que ejerce el amoníaco disuelto sobre este grupo bacteriano, tal como se detalló al explicar el esquema inhibitorio del proceso. Además, se incluye el efecto inhibitorio del pH a través de ψ_{pH}. Para este grupo bacteriano, los valores de pK_l y pK_h son 6.0 y 8.5 respectivamente, siendo 7.2 su pH óptimo.

El modelo de degradación anaeróbica propuesto y la estequiometría que lo caracteriza determinan qué especies y en qué cantidades relativas se encontrarán en el sistema. Así, se tiene ácidos grasos volátiles (acético, propiónico y butírico), dióxido de carbono y metano (biogas), amoníaco que se libera de la fracción insoluble, y las denominadas fracción soluble (la que es tratada como otra especie química) y la fracción no degradable, además de agua. Ahora bien, hasta ahora se ha tratado con la concentración total de cada una de estas especies, independientemente del equilibrio iónico y la influencia del pH, la solubilidad y el fenómeno de transferencia gas-líquido. Así, en adelante el denominado sistema acético considera las dos especies presentes en el equilibrio: el ácido acético sin disociar y el anión acetato. De igual manera se tienen los sistemas propionato y butirato, además de los sistemas carbonato, fosfato y amonio. Por ejemplo, el sistema carbonato está formado por el dióxido de carbono disuelto, los aniones carbonato y bicarbonato y el ácido carbónico sin disociar. Por otro lado, el dióxido de carbono que se encuentra por encima de la concentración de saturación se transfiere de la fase líquida a la fase gaseosa. Análogo razonamiento vale para el sistema amonio y fosfato, excepto que para este último no hay transferencia líquido-gas de ninguna de sus especies.

Con el comentario anterior se pretendió remarcar que la variable diferencial adoptada en el modelo es la concentración total C^t de un sistema. Ésta se define como la suma de todas las concentraciones de las especies que integran el sistema. Así, la ecuación de balance para un sistema, tal como se lo definió, tiene la siguiente expresión:

$$\frac{d}{dt}(VC_j^t) = Q_o C_j^o - Q_s C_j^t + \sum_{k=1}^{k=4} VY_j^k \mu_k (X_k + \xi X_k^f) - VK_{lg}(C_j^d - \frac{1}{H_j} P_t y_j) \qquad (21)$$

donde H_j es la constante de Henry para el componente j, expresada en atm l/mol; K_{lg} es el coeficiente de transferencia de masa, en d^{-1}; P_t es la presión total en atm e y_j es la fracción molar (mol/mol). Los supraíndices *t* y *d* significa total y disuelto,

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

respectivamente. Los demás símbolos tienen el mismo significado que en párrafos anteriores.

El último término de la ecuación representa la transferencia de masa líquido-gas del componente. Obviamente, para los sistemas que no tienen especies que se transfieren este término se anula en la ecuación de balance. El término que incluye la sumatoria ya se explicó anteriormente.

Así, y a modo de ejemplo, para el "sistema carbonato" la ecuación anterior se particulariza a la siguiente:

$$\frac{d}{dt}(VC_C^t) = Q_o C_C^{t\,o} - Q_s C_C^t - VK_{lg}^{CO_2}(C_{CO_2}^d - \frac{P_t\, y_{CO_2}}{H_{CO_2}}) + V(\mu_{acid} Y_{C0_2}^{acid} X_{acid} + \mu_{prop} Y_{C0_2}^{prop} X_{prop} + \mu_{but} Y_{C0_2}^{but} X_{but} + \mu_{met} Y_{C0_2}^{met} X_{met}) \quad (22)$$

donde $C_C^{t\,o}$ representa la concentración del sistema carbonato a la entrada del reactor y el último término computa la velocidad de producción neta de dióxido de carbono como producto de la degradación, expresada en mol/lt. Se aclara que se trata de una producción neta debido a que en la etapa acetogénica butírica el dióxido de carbono actúa como reactivo; por tal motivo el coeficiente Y para tal etapa es negativo.

Los sistemas amonio y fosfato tienen un tratamiento análogo.

Equilibrio iónico

A continuación se abordará el equilibrio iónico del sistema en estudio. El pH constituye una variable de operación de suma importancia en los sistemas biológicos, quedando determinado por la concentración de las especies iónicas presentes en el medio. Se define la suma de todas las concentraciones en el equilibrio que surjan de un ácido genérico H_pB (o base) debido a las reacciones ácido-base que se producen como la *concentración analítica* del ácido (o base), y se representa con el símbolo C_{HpB}^T. Esto es:

$$C_{H_pB}^T = \sum_{s=1}^{s=p} C_{H_{p-s}B} \quad (23)$$

donde el índice *p* indica el número de protones que posee el ácido H_pB y *q* indica el número de protones "perdidos" en las reacciones ácido-base por dicho ácido; así, *p-q* representa la cantidad de protones que tiene la especie en cuestión.

Ahora bien, compárese la definición de *concentración analítica* que se da aquí con la definición que se dió anteriormente de la variable diferencial *concentración total* de un *sistema* C_j^t. La concentración total del sistema carbonato

difiere de la concentración analítica del ácido carbónico en que la primera considera la concentración del dióxido de carbono disuelto en el medio, en tanto que la segunda no la incluye. Para mayor claridad:

$$C_C^t = C_{H_2CO_3}^T + C_{CO_2}^d \qquad (24)$$

siendo

$$C_{H_2CO_3}^T = C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{--}} \qquad (25)$$

Se debe notar que para los otros casos (sistema acético, propiónico, butírico, fosfato y amonio) ambas definiciones "coinciden".

Como la reacción

$$CO_2 + H_2O \rightleftharpoons H_2CO_3$$

se encuentra muy desplazada hacia la izquierda, se considera directamente el siguiente equilibrio:

$$CO_2 + H_2O \rightleftharpoons HCO_3^- + H^+$$

llamando K_1 a la constante de esta reacción. La información que se "pierde" es despreciable dado que la simplificación involucra a una especie neutra, que, como tal, no participa en el balance de cargas del sistema.

A partir de las constantes de equilibrio de las reacciones protolíticas y de la concentración analítica, se tienen las siguientes relaciones para un ácido monoprótico débil HB:

$$HB \rightleftharpoons H^+ + B^-$$

$$K_{HB} = \frac{C_{H^+} C_{B^-}}{C_{HB}} \qquad (26)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

siendo K_{HB} la constante de disociación del ácido y C_{HB} y C_{B^-} las concentraciones de ácido sin disociar y de su base conjugada, respectivamente, expresadas en mol/l. Operando algebraicamente se llega a la siguiente expresión:

$$C_{HB} = C_{HB}^{T} \frac{C_{H^+}}{C_{H^+} + K_{HB}} \qquad (28)$$

$$C_{HB}^{T} = C_{HB} + C_{B^-} \qquad (27)$$

Esta relación es válida para los ácidos grasos volátiles (acético, propiónico y butírico).

La generalización de la fórmula anterior para calcular la concentración de las especies en equilibrio para ácidos polipróticos débiles conduce a la siguiente ecuación:

$$C_{H_{p-q}B} = C_{H_pB}^{T} \frac{[C_{H^+}]^{p-q} \prod_{i=1}^{i=q} K_i}{D_{(p)}} \qquad (29)$$

siendo:

$$D_{(p)} = [C_{H^+}]^{p} + [C_{H^+}]^{p-1}K_1 + [C_{H^+}]^{p-2}K_1K_2 + ... + [C_{H^+}]K_1K_2...K_{p-1}K_{p-1} + K_1K_2...K_{p-1}K_{p-1}K_p \qquad (30)$$

y, como se definió anteriormente,

$$C_{H_pB}^{T} = \sum_{s=0}^{s=p} C_{H_{p-s}B} \qquad (31)$$

K_i es la i-ésima constante de disociación del ácido y Π indica productoria de constantes de disociación K_i. Como se indicó anteriormente, *p* indica el número de protones que posee el ácido H_pB y *q* indica el número de protones “perdidos” en las reacciones ácido-base por dicho ácido; *p*-*q* representa la cantidad de protones que tiene la especie en cuestión.

A modo de ejemplo, se incluyen las relaciones para calcular las concentraciones de las especies correspondientes al ácido fosfórico:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$C_{H_3PO_4} = C^T_{H_3PO_4} \frac{[C_{H^+}]^3}{D_{H_3PO_4}} \quad (32)$$

$$C_{H_2PO_4^-} = C^T_{H_3PO_4} \frac{[C_{H^+}]^2 K_1}{D_{H_3PO_4}} \quad (33)$$

$$C_{HPO_4^{--}} = C^T_{H_3PO_4} \frac{C_{H^+} K_1 K_2}{D_{H_3PO_4}} \quad (34)$$

$$C_{PO_4^{---}} = C^T_{H_3PO_4} \frac{K_1 K_2 K_3}{D_{H_3PO_4}} \quad (35)$$

siendo

$$D_{H_3PO_4} = [C_{H^+}]^3 + [C_{H^+}]^2 K_1 + C_{H^+} K_1 K_2 + K_1 K_2 K_3 \quad (36)$$

y

$$C^T_{H_3PO_4} = C_{H_3PO_4} + C_{H_2PO_4^-} + C_{HPO_4^{--}} + C_{PO_4^{---}} \quad (37)$$

Las concentraciones de las especies correspondientes al ácido carbónico y amonio se obtienen de manera análoga. Para la disociación del agua se tiene:

$$C_{OH^-} = \frac{K_w}{C_{H^+}} \quad (38)$$

siendo K_w el producto iónico del agua (10^{-14} mol^2/l^2)

Las concentraciones de las especies iónicas presentes en el medio deben satisfacer el balance de cargas del sistema, que tiene la siguiente expresión:

$$C_{H^+} - (C_{H_2PO_4^-} + 2C_{HPO_4^{--}} + 3C_{PO_4^{---}} + C_{HCO_3^-} + 2C_{CO_3^{--}} + C_{Ac^-} + C_{Pr^-} + C_{But^-} + C_{An^-} + C_{OH^-} - C_{Z^+} - C_{NH_4^+}) = 0 \quad (39)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Así, la satisfacción de la ecuación anterior, junto a las relaciones de equilibrio, fijan todas las concentraciones de las especies presentes en el medio, por lo que el cálculo del pH del sistema es directo:

$$pH = -\log_{10}(C_{H^+}) \qquad (40)$$

El pH constituye una variable de operación de suma importancia en los sistemas biológicos. Tal como se explicó detalladamente en la sección introductora, el proceso de metanización a partir de un sustrato complejo consiste en una población mixta de microorganismos. Las condiciones ambientales óptimas pueden diferir entre los diferentes grupos bacterianos que componen el consorcio; por tal motivo se torna importante el seguimiento del pH del biorreactor. El modelo debe incluir la posibilidad de corregir el pH del sistema; por esta razón se han incorporado como variables diferenciales la concentración total de "otros aniones" (C_{An-}) y la concentración total de "otros cationes" (C_{z+}), entendiendo por los primeros aquéllos que no pertenecen a los sistemas acético, carbonato, etc. tratados anteriormente, sino que hacen referencia a, por ejemplo, ión cloruro, ión sulfato, etc.; mientras que los segundos comprenden a cationes distintos al ión amonio e ión hidrógeno. De esta manera se tienen las dos ecuaciones de balance siguientes:

$$\frac{d}{dt}(VC_{An^-}) = Q_o C^o_{An^-} - Q_s C_{An^-} \qquad (41)$$

$$\frac{d}{dt}(VC_{Z^+}) = Q_o C^o_{Z^+} - Q_s C_{Z^+} \qquad (42)$$

Las ecuaciones (41) y (42) lucen "simples" debido a que estas especies no intervienen en reacciones químicas, sino que son afectadas solamente por el "efecto dilución". No obstante, debiera preverse la posibilidad de formación de precipitados, tales como sulfato de calcio, a fin de ganar en rigurosidad.

Fase gaseosa

Según el modelo propuesto en este capítulo, los productos finales de la fermentación anaeróbica son biogas (metano y dióxido de carbono), agua y biomasa. Tal como se expuso en las hipótesis efectuadas en sección XVIII.2.2. no se considera la transferencia líquido-gas del amoníaco; además, se considera despreciable la fracción molar del agua en la fase gaseosa respecto a la fracción molar del biogas. Así, las ecuaciones que describen la fase gaseosa incluyen solamente metano y dióxido de carbono. Se tratan de ecuaciones algebraicas debido a que la velocidad de producción queda determinada a partir de las concentraciones de los distintos grupos bacterianos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

en la fase líquida, de sus velocidades específicas de crecimiento y de los correspondientes coeficientes de rendimiento Y_j^k para dióxido de carbono y metano. De esta manera se considera al proceso instantáneo con respecto a los previamente discutidos, en los cuales, al emplear una ecuación diferencial, obviamente se involucra la dinámica.

Así la *producción volumétrica molar P* de metano está dada por:

$$P_{CH_4} = \mu_{prop} Y_{CH_4}^{prop} X_{prop} + \mu_{but} Y_{CH_4}^{but} X_{but} + \mu_{met} Y_{CH_4}^{met} X_{met} \qquad (43)$$

Debido a que se considera insolubilidad del metano en la fase líquida, esta expresión, afectada por el volumen de reacción V, computa su velocidad de transferencia a la fase gaseosa.

Obviamente, una relación análoga se aplica a la *producción volumétrica molar* de dióxido de carbono, pero la *velocidad de transferencia* a la fase gaseosa depende de la solubilidad de éste en el líquido. La velocidad de transferencia del dióxido de carbono está dada por:

$$T_{CO_2} = VK_{t_{CO_2}} \left(C_{CO_{2\,d}} - \frac{P_t y_{CO_2}}{H_{CO_2}}\right) \qquad (44)$$

siendo T la velocidad de transferencia líquido-gas en moles por día.

En la ecuación (44) interviene la fracción molar del dióxido de carbono que, a su vez, depende de la velocidad de transferencia de las especies, que es justamente lo que se quiere determinar; así, se tiene que recurrir a un método iterativo de resolución. Las relaciones que se necesitan son:

$$y_{CO_2} = \frac{M_{CO_2}^s}{M_{tot}^s} \qquad (45a)$$

$$y_{CH_4} = \frac{M_{CH_4}^s}{M_{tot}^s} \qquad (45b)$$

siendo:

$$M_{tot}^s = M_{CH_4}^s + M_{CO_2}^s \qquad (46)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde M representa caudales molares (mol/d) y *e* y *s* hacen referencia a entrada y

$$M^{s}_{CO_2} = M^{e}_{CO_2} + T_{CO_2} \qquad (47)$$

$$M^{s}_{CH_4} = M^{e}_{CH_4} + VP_{CH_4} \qquad (48)$$

salida, respectivamente. La inclusión de los caudales molares de entrada tendrán su justificación al incorporar el modelo de reactores tanque agitados en serie, dado que las corrientes de salida de un reactor constituyen las corrientes de entrada del siguiente.

XVIII.2.2.2 ***Esquema de cálculo***

El esquema de cálculo para resolver numéricamente el modelo es el siguiente:
1.- De las condiciones iniciales de las variables diferenciales y variables algebraicas (como temperatura y presión total) se determinan las concentraciones de las especies en equilibrio, el pH del sistema y la composición de la fase gas en forma iterativa (variables algebraicas)
2.- Con las condiciones iniciales y las variables algebraicas anteriores, junto a parámetros (biológicos y de transferencia) se determinan las velocidades de crecimiento específicas y las velocidades de utilización de sustratos de todos los grupos bacterianos. Además, se obtiene la velocidad de transferencia de materia.
3.- Con los valores obtenidos en (2), las condiciones iniciales de las variables diferenciales y las variables algebraicas calculadas quedan determinados los miembros derechos de las ecuaciones diferenciales.
4.- A partir del conocimiento de los miembros derechos, el integrador de ecuaciones diferenciales entrega el nuevo valor de las variables diferenciales al siguiente tiempo.
5.- Con estos nuevos valores de las variables diferenciales se procede de la misma manera hasta el tiempo final de integración.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

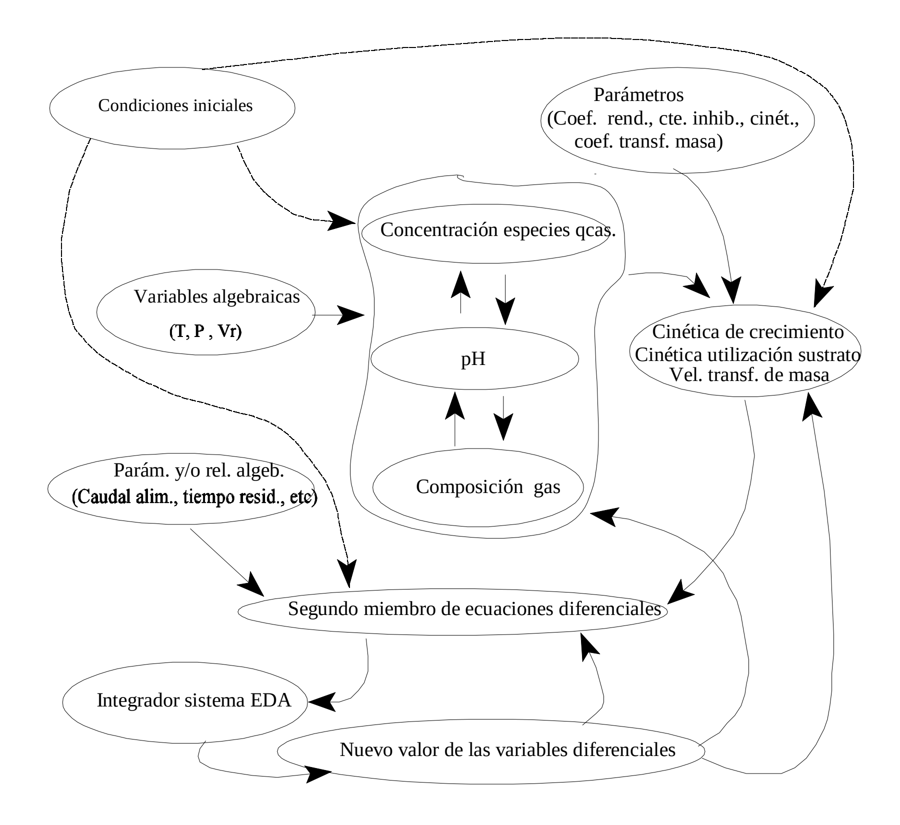


Figura XVIII.3 Esquema de cálculo

Para un mejor entendimiento de la secuencia de cálculo se presenta un esquema del mismo en la Fig. 3. Se entiende que, tanto en el esquema como en el texto, las condiciones iniciales se utilizan para iniciar el cálculo; después se reemplazan por los nuevos valores de las variables. Por esta razón se grafican en línea punteada.

Ejemplo de aplicación

A modo ilustrativo y para poner de manifiesto el uso que se le puede dar al modelo matemático presentado en este capítulo se toma de la bibliografía (Angelidaki et al., 1993) el siguiente caso: la degradación anaeróbica de residuo de ganado, cuya composición se muestra en la tabla 3. Además de las concentraciones de los distintos componentes, se reportan los parámetros estequiométricos Y_e, n y m que caracterizan a este sustrato; en tanto que en la tabla 1 se incluyen los coeficientes de rendimiento

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

de todas las etapas consideradas que resultan de la estequiometría que se presenta en la sección XVIII.2.2.

Se recuerda que el signo (-) indica que tal especie se consume en esa etapa particular. Las constantes cinéticas (velocidades específicas máximas de crecimiento μ_{max} y las constantes de saturación K_s e inhibición K_i), al igual que los parámetros pK_l y pK_h de la función de inhibición por pH (ψ_{pH}) se incluyen en la tabla 4 (misma referencia).

	$(C_6H_{10}O_5)_s$	NH_3	acét.	prop.	but.	CH_4	CO_2
Acidog.	-12.6	-113	16.93	25.2	28.57	-	18.23
Deg. prop.	-	-113	7.49	-7.0	-	10.6	43.58
Deg. but.	-	-113	3.90	-	-7.38	16.57	-13.31
Metanog.	-	-113	-2.48	-	-	2.63	2.63

Tabla XVIII.1 Coeficientes de rendimiento (g biomasa/mol esp. qca.)

En la tabla 2 se presentan las constantes de equilibrio y solubilidad; más precisamente, se dan los coeficientes que se utilizan en la expresión polinómica en la temperatura T:

$$X_T = X_{T_o} + a(T - T_o) + b(T - T_o)^2 + c(T - T_o)^3 \qquad (49)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Prop.	X(55°C)	X(T_o)	T_o	a[a]	b	c
Solub. NH_3	17.68	52.9	0°C	-1.454	0.021	$-1.13\ 10^{-4}$
pKa NH_3	8.416	10.05	0°C	-0.0333	$2.43\ 10^{-5}$	$7.43\ 10^{-7}$
pK_a Ac.	4.76	-	-	-	-	-
pK_{aPr},pK_{aBut}	4.89	-	-	-	-	-
Solub.CH_4	0.00112[b]	-	-	-	-	-
Solub.CO_2	0.017	0.0697	0°C	-0.002	$2.56\ 10^{-5}$	$-1.12\ 10^{-7}$
pK_{a1} CO_2 $pK_{a2}CO_2$	6.295 10.15	6.539 10.619	0°C 0°C	-0.010 -0.014	$1.01\ 10^{-4}$ $1.01\ 10^{-4}$	0 0
pK_a $H_2PO_4^-$	7.21	-	-	-	-	-

[a] En el rango 30-60°C; [b] M/atm

Tabla XVIII.2 Constantes de equilibrio usadas en el modelo

Componente	Concentración
Materia orgánica insoluble $(C_6H_{10}O_5\ .\ n\ NH_3)_{is}$, $Y_e = 0.55$, n = 0.454, m = 0.34	30.6 g/l
Materia orgánica soluble $(C_6H_{10}O_5)_s$ Acetato Propionato Butirato	 5.4 g/l 4.5 g/l 2.3 g/l 0.2 g/l
Orgánicos totales	43.0 g/l
NH_4^+ - N disuelto	2.5 g N/l
NH_3 - N orgánico ligado	1.2 g N/l
Fósforo	0.55 g P/l
Z^+	5.45 g K/l[a]

Tabla XVIII.3 Composición del estiércol de ganado utilizada en las simulaciones

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Grupo	Constantes cinéticas			Depend. con T			Inhib. pH	
	$\mu_{max\ a}T_{opt}$	K_s	K_i	a	T_{opt}	T_{max}	pK_1	pK_2
	d^{-1}	g/l	g/l	$d^{-1}°C^{-1}$	°C	°C		
Hidrolit.[#]	1.0[*]	-	0.33 (VFA)[a]	0.0	55	65	-	-
Acidog.	5.0	0.500 (glc)	-	0.0	55	65	-	-
A. Prop.	0.54	0.259 (HPr)	0.96 (HAc)	$1.7\ 10^{-4}$	53	65	6.0	8.5
A. But.	0.68	0.176 (HBut)	0.72 (HAc)	$1.8\ 10^{-4}$	60	70	6.0	8.5
Metanog	0.60	0.120 (HAc)	0.26 (NH_3)	$1.7\ 10^{-4}$	55	65	6.0	8.5

[#] Enzimas del grupo acidog. / [*] Entiéndase por k_{HID}. [a] AGV (Ácidos Grasos Volátiles) como acetato.

Tabla XVIII.4 Constantes cinéticas utilizadas en el modelo

A continuación se presentan los resultados de las simulaciones efectuadas a partir del estado inicial del sistema que se detalla en la tabla 5. Las condiciones iniciales para la biomasa representan las concentraciones de las especies biológicas después de la inoculación del reactor, referidas al volumen de reacción total, mientras que las otras condiciones iniciales son las concentraciones de los componentes que “acompañan” a las poblaciones inoculadas. Se debe destacar que los inóculos de estos sistemas son barros extraídos de otros digestores en operación. En la tabla 6 se incluyen los principales parámetros de operación y diseño para este caso.

En la Fig. 4 se presenta la evolución de la materia orgánica insoluble, no biodegradable, y la fracción soluble (la proveniente de la hidrólisis más la que ingresa en la alimentación). La evolución de los cuatro grupos bacterianos se muestra en la Fig. 5 y la de los ácidos grasos volátiles (AGV), el pH y composición del gas en las Fig. 6a, 7a y 8, respectivamente.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Componente		Concent.	Componente	Concent.
Org. Insolub.		30.6 g/l		mol/l
$(C_6H_{10}O_5)_s$		0.0325 g/l	Fosfato[a]	$7.24\ 10^{-2}$
No biodeg.		0	Carbonato[a]	$7.23\ 10^{-2}$
AGV[b]		mol/l	Amoníaco[a]	$7.24\ 10^{-2}$
	HAc	5.4610^{-4}	Cationes	$2.86\ 10^{-1}$
	HPr	7.7410^{-4}	Aniones	$1.8\ 10^{-1}$
	HBut	3.6610^{-4}		
Biomasa		g/l		
	Acidog.	$8.8\ 10^{-2}$		
	A. Prop.	$2.15\ 10^{-1}$		
	A. But.	$8.01\ 10^{-2}$		
	Metanog	$2.92\ 10^{-1}$		

[a] Total
[b] Ácidos grasos volátiles
Tabla XVIII.5 Condiciones iniciales

Parámetro	Valor
Volumen de reacción	10 l
Tiempo de residencia hidráulico	15 días
Temperatura	55°C

Tabla XVIII.6 Otros parámetros de entrada

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

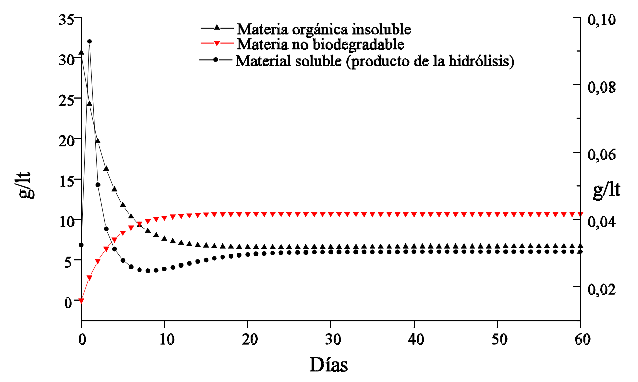


Figura XVIII.4. Comportamiento transiente de material insoluble, no biodegradable y soluble a partir del estado inicial dado en Tabla XVIII.5

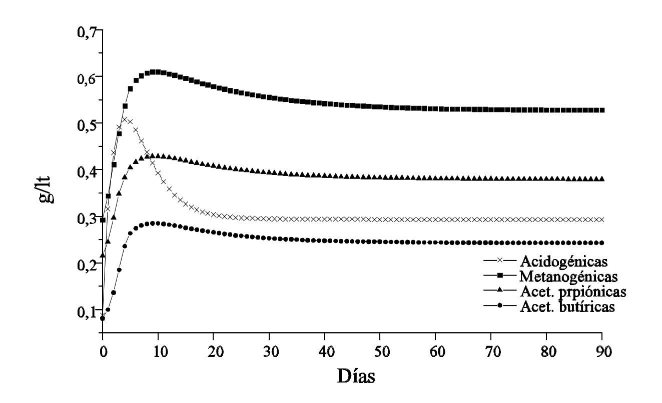


Figura XVIII.5 Comportamiento transiente de la biomasa.(a partir del estado inicial dado en Tabla XVIII.5

El pico en la concentración de la materia soluble que exhibe la Fig. 4 se debe a que su concentración en la corriente de alimentación es superior a la presente en el biorreactor al tiempo cero; además la hidrólisis del material insoluble contribuye en aumentar la concentración de la fracción soluble. Esto se debe a la baja velocidad de utilización de este "componente" por las bacterias acidogénicas dada su baja concentración inicial. Tal como se observa en la Fig. 5, a medida que transcurre el

tiempo aumenta la concentración de este grupo bacteriano haciendo que la concentración residual de la fracción soluble tienda a su valor estacionario. A diferencia de lo que ocurre con la fracción soluble, se tiene la misma concentración de la fracción orgánica insoluble en la corriente de alimentación y en el medio de reacción, tal como se observa en las tablas 3 y 5; de ahí que no haya pico en la evolución de la concentración, sino que, por el contrario, se observa una disminución exponencial de la misma hasta su valor estacionario, debido a que la concentración de enzimas aumenta con la concentración del grupo bacteriano que las produce, esto es, la concentración de bacterias acidogénicas.

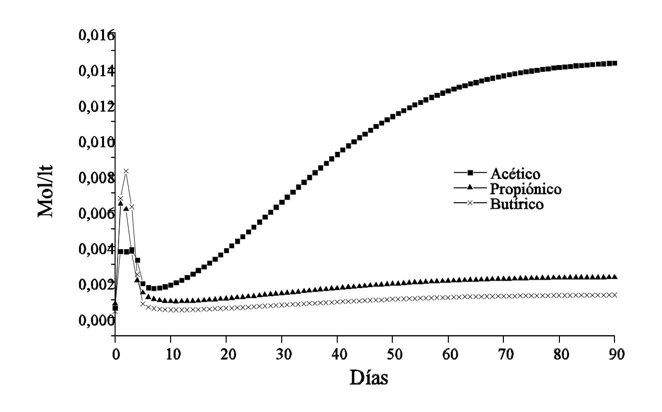


Figura XVIII.6a Comportamiento transiente de los ácidos grasos volátiles a partir del estado inicial dado en Tabla XVIII.5

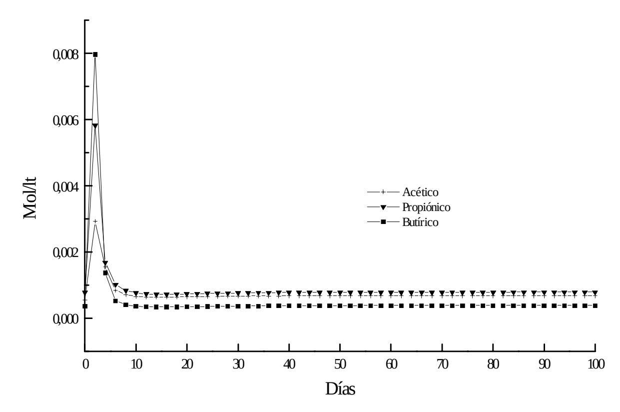


Figura XVIII.6b Comportamiento transiente de los AGV a partir del estado inicial de Tabla XVIII.5. Concentración de “otros aniones” en la alimentación: 0.2M

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

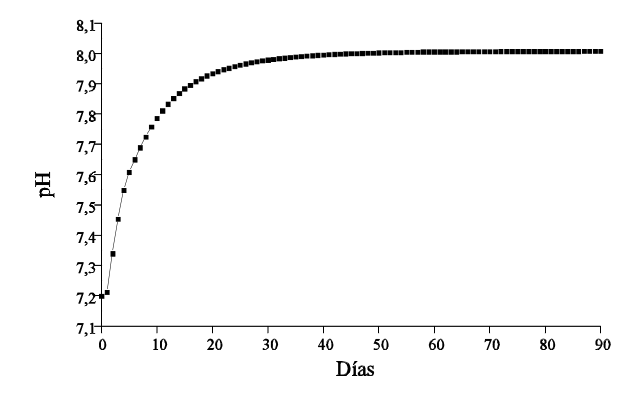


Figura XVIII.7a Evolución del pH a partir del estado inicial dado en Tabla XVIII.5

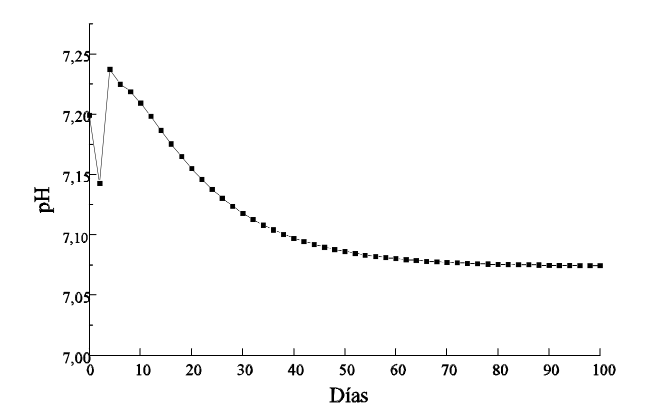


Figura XVIII.7b. Evolución del pH a partir del estado inicial de Tabla XVIII.5. Concentración de "otros aniones" en la alimentación: 0.2M

El análisis de los sustratos intermedios, fundamentalmente ácidos volátiles (Fig. 6a)debe efectuarse tomando en consideración que, por un lado, estos componentes intervienen en ciertas etapas del proceso de degradación como sustratos

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

y en otras como productos, y, por otro lado, la influencia de los efectos inhibitorios del proceso total. Tal como se vió anteriormente, el pH óptimo del sistema es aproximadamente 7.2. En la Fig. 7a se observa que el sistema se estabiliza en un pH de 8. En la Fig. 6a se observa que a este pH la concentración de ácido acético en el estado estacionario es relativamente alta. Si bien hay varios factores que determinan estos altos niveles de ácido acético, tiene peso el factor de inhibición por pH ψ_{pH} (ec. 16). En efecto, en las Fig. 7b y 6b se representa la evolución del pH y de los ácidos grasos volátiles, respectivamente, cuando se incluye en la alimentación una concentración de ácido fuerte (0.20 Mol/l). Como el pH se estabiliza en un valor más próximo al óptimo, la concentración de ácido acético y la de los demás ácidos disminuye, esto es, el reactor opera más eficientemente. Finalmente, en la Fig. 8 se observa la evolución de la composición del biogas a partir del estado inicial indicado en la tabla 5.

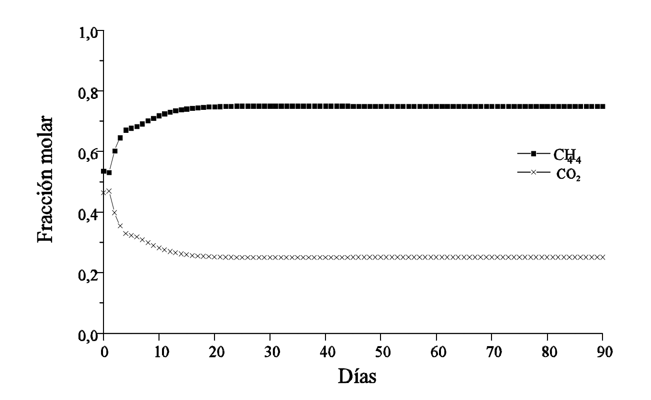


Figura XVIII.8 Evolución de la composición de la fase gaseosa a partir del estado inicial dado en Tabla XVIII.5.

El estado estacionario que se alcanza a partir de los parámetros y/o datos de entrada de las tablas 1 a 6 se reporta en la tabla 7.

Las estrategias de control y puesta en marcha en sistemas biológicos es sumamente importante, y por tal razón se necesitan modelos como los presentados en este capítulo. En efecto, las respuestas del sistema ante distintas perturbaciones permiten estudiar los efectos de las variables de operación sobre la performance del reactor. Si bien los mecanismos inhibitorio-regulatorios son fáciles de entender “individualmente”, es decir, los efectos inhibitorios de un componente en una determinada etapa de degradación, cuando se intenta analizar el proceso “completo”la

situación se torna compleja debido a la alta interdependencia de las especies biológicas entre sí, y de éstas con sus sustratos y agentes inhibidores.

Comp.		**Conc.**	**Comp.**		**Conc.**
Org.Insol.		6.71 g/l	Fosfato		mol/l
$(C_6H_{10}O_5)_s$		0.031 g/l		H_3PO_4	$2.29\ 10^{-7}$
AGV		mol/l		$H_2PO_4^-$	$2.44\ 10^{-3}$
	HAc	$8.2\ 10^{-6}$		HPO_4^{-2}	$1.53\ 10^{-2}$
	Ac^-	$1.45\ 10^{-2}$		PO_4^{-3}	7.4710^{-7}
	HPr	$1.75\ 10^{-6}$	Carbonato		mol/l
	Pr^-	$2.3\ 10^{-3}$		CO_2d	$4.35\ 10^{-3}$
	HBut	$9.8\ 10^{-7}$		HCO_3^-	0.22
	But-	$1.3\ 10^{-3}$		CO_3^{-2}	$1.6\ 10^{-3}$
Biomasa		g/l	Amonio		mol/l
	Acidog	0.29		NH_3d	$5.45\ 10^{-2}$
	A. Prop.	0.38		NH_4^+	0.14
	A. But.	0.24	Cationes		0.14 mol/l
	Metanog..	0.53	Aniones		0.0
pH		8.01			
Comp. gas		fracción			
	CH_4	0.75			
	CO_2	0.25			

Tabla XVIII.7 Estado estacionario obtenido a partir de datos de tablas XVIII.1, 2 y 3.

A modo de ejemplo, se presentan las respuestas del sistema ante dos tipos de perturbaciones: un pulso y un escalón en la concentración de materia insoluble. El escalón consistió en aumentar tres veces la concentración de materia insoluble en la alimentación, y el pulso en aumentar diez veces la concentración de tal "especie". La respuesta al pulso se muestra en las Fig 9, 10 y 11, y la respuesta al escalón en las tres siguientes.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

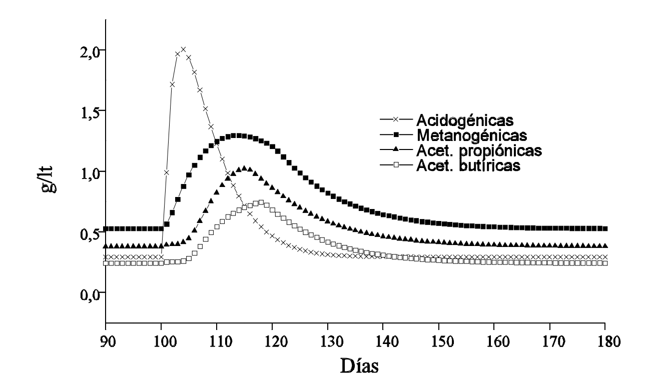


Figura XVIII.9 Respuesta de la biomasa a un pulso de materia orgánica insoluble (diez veces la concentración de entrada).

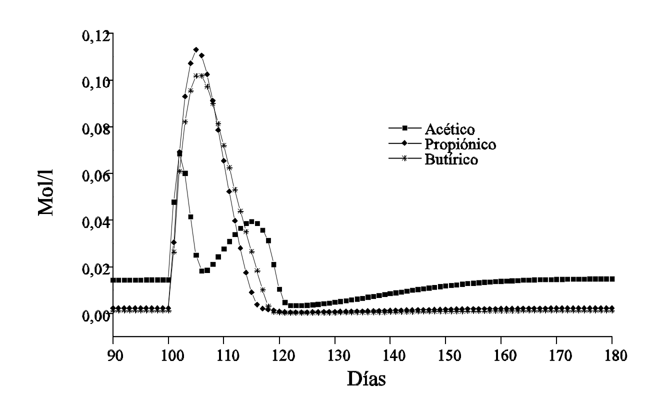


Figura XVIII.10 Respuesta de ácidos grasos volátiles a un pulso en materia orgánica insoluble (diez veces la concentración de entrada)

Estas figuras ponen de manifiesto una característica que distingue a los procesos biológicos anaeróbicos cuando se trabaja con sustratos complejos como el utilizado en el presente ejemplo: los largos períodos que transcurren entre dos estados estacionarios cuando se introduce una perturbación en el sistema. Así, las Fig. 9 y 10 muestran que se necesitan aproximadamente 50-60 días para que el sistema retorne

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

a su estado estacionario. Por esta razón el trabajo experimental con sistemas de estas características se torna algo complicado y tedioso, haciendo que la simulación se constituya en una herramienta complementaria de suma importancia.

La Fig. 11 revela otra característica de estos procesos, pero fundamentalmente de aquéllos que poseen un elevado contenido de material nitrogenado: la alta estabilidad del sistema, esto es, aunque la perturbación introducida causa efectos prolongados, el sistema no experimenta la "ruptura". Esta característica fue oportunamente resaltada al explicar el esquema inhibitorio-regulatorio del modelo.

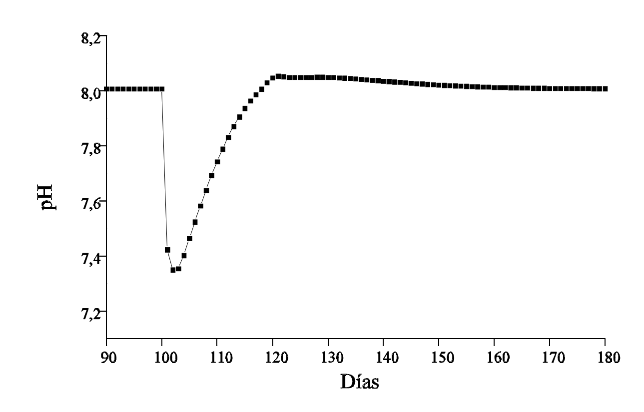


Figura XVIII.11 Respuesta del pH a un pulso en materia orgánica insoluble (diez veces la concentración de entrada)

En las Fig. 12, 13 y 14 se presenta la respuesta del sistema ante la perturbación tipo escalón.

De las figuras se puede observar que, además del efecto auto estabilizante del sistema ante importantes perturbaciones en la carga, el estado estacionario que se alcanza presenta valores de concentración de ácidos volátiles muy próximos a los que tenía el sistema antes de la perturbación; mientras que la biomasa aumenta significativamente. Esto se debe a que el sistema opera a un pH más próximo al pH óptimo, con lo cual aumenta la eficiencia del sistema. En la Fig. 14 se muestra la evolución del pH.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

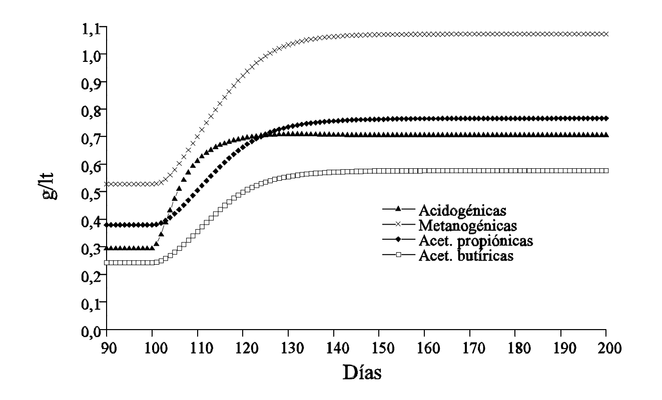


Figura XVIII.12 Respuesta de la biomasa a un escalón en materia orgánica insoluble (tres veces la concentración inicial)

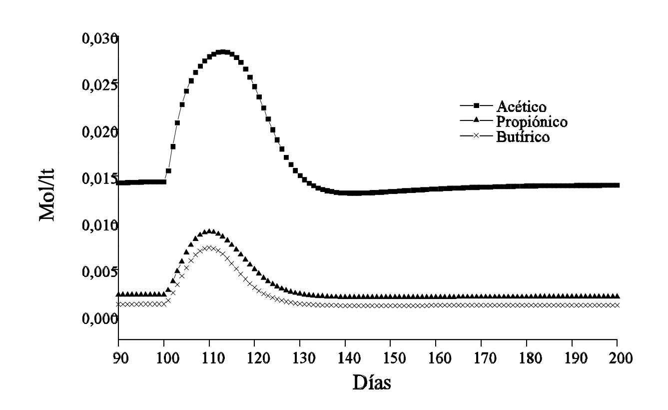


Figura XVIII.13 Respuesta de ácidos grasos volátiles a un escalón en materia orgánica insoluble (tres veces la concentración inicial)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

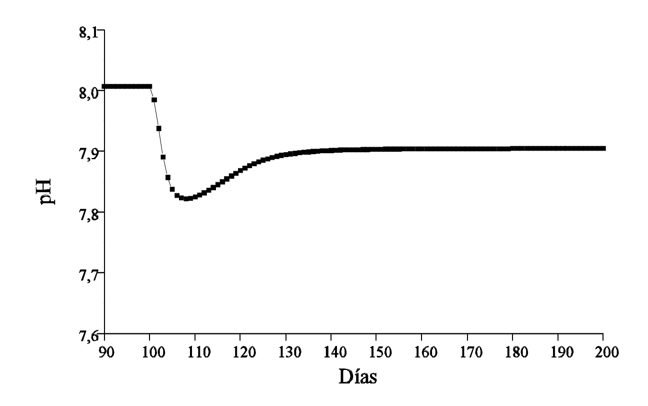


Figura XVIII.14 Respuesta del pH a un escalón en materia orgánica insoluble (tres veces la concentración inicial)

XVIII.3 MODELO DE REACTOR TANQUE AGITADO CONTINUO NO IDEAL

Hay situaciones donde las aproximaciones a las condiciones de mezcla perfecta y flujo pistón no son válidas. Esto puede deberse a las características propias del equipo que determinan no-uniformidades en las líneas de corriente, resultando, por ejemplo, en un "bypass" de fluido. En tales circunstancias, el interés se centra en implementar pruebas para determinar la exacta no-idealidad del patrón de flujo, y remediarla si fuera posible. Las mayores aplicaciones tienen lugar en aquellos reactores con configuraciones inherentemente complejas, tales como columnas de burbujeo, lecho fluidizados, reactores “slurry”, etc..

Las técnicas que se han desarrollado para abordar estas cuestiones utilizan nociones de distribución de propiedades de los fluidos reaccionantes, en el sentido de la teoría de probabilidad. Cuando la propiedad es el tiempo de residencia de los elementos de los fluidos circulantes se trata del estudio de la distribución de los tiempos de residencia (DTR); en tanto que cuando la propiedad es, por ejemplo, la actividad catalítica de las partículas o el tamaño del cristal en un cristalizador, se recurre al "balance poblacional de partículas". Si bien esta última es más general porque se puede aplicar a otras propiedades distintas al tiempo de residencia, los métodos DTR están más ampliamente difundidos.

La aplicación directa de la distribución de tiempos de residencia para predecir el comportamiento de un reactor químico se basa en considerar la extensión de la

reacción química en los elementos de fluido y luego sumar sobre todos los elementos cuando abandonan el reactor. En otras palabras, cada elemento del fluido se considera como un pequeño reactor batch, y la conversión total del reactor es el "promedio" sobre los elementos de fluido.

Hay varios modelos para representar patrones de flujo que han encontrado aplicaciones útiles. Cuando su aplicación representa adecuadamente la situación física, los dos más difundidos son el modelo de dispersión axial y el modelo de tanques agitados de mezcla perfecta en serie; este último modelo se introduce en este capítulo para abordar el modelado de flujo no-ideal. Para mayores detalles ver Levenspield (1972) y Froment y Bischoff (1990).

XVIII.3.1 *Modelo de reactores tanques agitados en serie con recirculación externa.*

El sistema hipotético de infinitos tanques sin recirculación permite modelar un reactor de flujo pistón ideal, mientras que a medida que se aumenta la relación de recirculación el sistema se aproxima a un reactor de mezcla completa. Se entiende por relación de recirculación R al cociente entre la corriente de recirculación y la corriente de salida del sistema. Para tasas de recirculación intermedias se pueden modelar situaciones de interés práctico.

Si bien disponer de un modelo para un reactor tanque agitado continuo (TAC) hace que el modelado de una serie de éstos sea relativamente sencillo, el conjunto de ecuaciones que se debe resolver aumenta notablemente con el número de reactores conectados, a la vez que crece la complejidad matemática subyacente debido a la alta no-linealidad del sistema de ecuaciones.

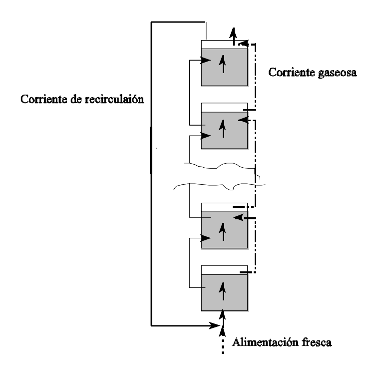


Figura XVIII.15. Cascada de reactores tanques agitados continuos

El modelo que se presenta en esta sección permite, entre otras cosas, determinar cuál es el número de reactores adecuado para representar el flujo pistón

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ideal y la relación de recirculación a la cual no se presentan perfiles de concentración en el sistema.

En la Fig. 15 se presenta un esquema del sistema planteado.

Una presentación del modelo matemático completo del sistema agrega las ecuaciones del modelo del mezclador M, del divisor de flujo D y las de conectividad entre las distintas unidades, a las ecuaciones presentadas anteriormente para resolver el modelo de un sólo reactor tanque agitado continuo ideal.

Brevemente, según las hipótesis planteadas, una configuración con 14 unidades con recirculación requiere la resolución de 210 ecuaciones diferenciales y más de 1000 ecuaciones algebraicas y condiciones iniciales.

Las simulaciones en estado estacionario permiten concluir sobre los perfiles de concentración, fundamentalmente de sustrato y pH, a lo largo del reactor. Tanto altas como bajas concentraciones de sustrato, producto e ión hidrógeno en ciertas regiones del reactor pueden disminuir su performance, ya sea por insuficiente disponibilidad de sustrato, inhibiciones por producto y/o sustrato o inhibición por pH de grupos bacterianos específicos que desbalancea la composición de la población microbiana.

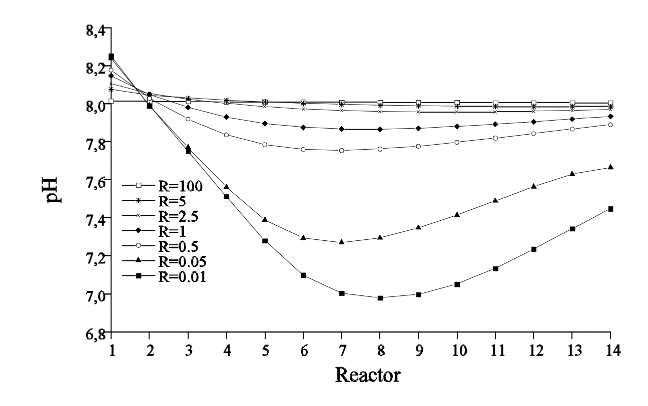


Figura XVIII.16 Efecto de la relación de recirculación R sobre perfiles estacionarios de pH

A modo de ejemplo y para poner de relieve la importancia de disponer de modelos como el que se presenta en esta sección se incluye la Fig. 16, en la que se muestran los perfiles de pH que se obtienen para un sistema con 14 unidades cuando se adoptan distintas relaciones de recirculación R.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Se puede apreciar que la adopción de una relación de recirculación superior a 5 es adecuada para modelar la situación de mezcla perfecta. Nótese que para una R menor a 5 se produce una variación del pH en los reactores; ahora bien, como cada reactor debe asociarse con un “segmento o porción” de un reactor tubular, este perfil está indicando una variación en la coordenada longitudinal del reactor. Queda claro que las variaciones en la coordenada radial no son tenidas en cuenta por este modelo; si fuera necesario hacerlo se debe recurrir a ecuaciones diferenciales a derivadas parciales. Nótese, además, que la adopción de 14 unidades para modelar un sistema tubular de 7 metros de longitud implica una segmentación de éste de 50 cm por unidad, que a los fines prácticos, es aceptable.

A partir del análisis realizado en el capítulo XIV para destilación reactiva, en el capítulo XVII para un desalador de aguas de mar y aquí, para una serie de reactores conectados en serie (o “etapas” del reactor real), se concluye que la “discretización” de un sistema continuo en etapas es una estrategia muy común y eficiente para el modelado que tiene aplicación no solamente en la ingeniería química, ya que, por ejemplo, en mecánica de estructuras se recurre a la discretización en las tres direcciones.

XVIII.4 INTRODUCCIÓN AL MODELADO DE REACTORES DE BIOFILM

Como se ha mencionado, los reactores de biofilm son más eficientes debido a que permiten una mayor eficiencia por unidad de volumen de reactor. El modelado de los mismos es más complejo debido a que se debe considerar la dinámica del desarrollo del biofilm, además de los fenómenos de transporte de nutrientes desde y hacia el mismo, al igual que el crecimiento de los microorganismos soportados. En general se pueden considerar dos casos característicos. En uno de ellos, cuando el régimen de operación es turbulento, se puede suponer que la resistencia al flujo de materiales por parte de la película que rodea al biofilm es despreciable. En el caso opuesto, existirá resistencia a dicho transporte, por lo que el crecimiento y metabolismo de los microorganismos, y por lo tanto la eficiencia del reactor, estará limitada por el flujo y no por la cinética. Para un análisis más profundo debe calcularse el módulo de Thiele, en función del cual se puede determinar la situación operante en cualquier caso particular. Por lo general industrialmente se trata de operar de tal forma de lograr un estado limitado por cinética.

A modo de ejemplo, a continuación se considera un conjunto de hipótesis que permiten plantear un modelo sencillo de reactor con microorganismos soportados:

- Uniformidad en la fase biofilm.
- La densidad del biofilm es uniforme.
- Las expresiones cinéticas correspondientes para crecimiento suspendido son aplicables para crecimiento soportado.
- No se consideran limitaciones difusionales en el biofilm.

Generalmente los modelos matemáticos que describen la acumulación de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

biofilm suponen frecuentemente una distribución uniforme de microorganismos sobre el soporte inerte como condición inicial para resolver el sistema de ecuaciones resultante (Characklis et al, 1990). No obstante, en muchos casos el interés se centra en simular la puesta en marcha biológica (colonización) del soporte "limpio", por lo que se deben incluir los denominados "eventos iniciales". Desafortunadamente, son escasos los trabajos que informen sobre datos experimentales y/o presenten modelos con sus parámetros para el fenómeno de colonización en sistemas anaeróbicos. En este capítulo, se incluye un modelo para la "cinética" de biofilm que considera una expresión de primer orden en la concentración de biomasa en el biofilm para la velocidad de pérdida "combinada" por esfuerzo de corte-decaimiento (Rittmann, 1982), y una expresión de primer orden en la concentración de biomasa en el "bulk" líquido para el fenómeno de adsorción- adherencia.

Para lograr el modelo que se busca, se deben incorporar las ecuaciones del modelo de biofilm y las correspondientes ecuaciones diferenciales para todas las especies biológicas relacionadas al mismo al modelo ya discutido de biomasa suspendida. La introducción de la función indicadora de presencia de biofilm ξ (FIPB) en las ecuaciones de balance para la biomasa en el modelo de reactor tanque agitado ideal hace posible el "switch" entre el modelo de crecimiento suspendido y el de crecimiento soportado mediante la asignación $\xi=1$. En efecto, la activación de la FIPB permite computar tanto los fenónemos inherentes a la biomasa suspendida necesarios para la colonización del reactor como el consumo de sustrato por las bacterias suspendidas y soportadas. Se considera oportuno incluir nuevamente las ecuaciones ya presentadas en la sección XVIII.2.2.1 (ec. 14 y 18) a los efectos de facilitar el seguimiento:

$$\frac{d}{dt}(VC_j) = Q_o C_j^{\,o} - Q_s C_j + \sum_{k=1}^{k=4} V Y_j^{\,k} \mu_k (X_k + \xi X_k^f)$$

$$\frac{d}{dt}(VX_k) = Q_o X_k^{\,o} - Q_s X_k + V(\mu_k - u_k) X_k - \xi V (K_{nd} X_k - K_{dd} X_k^f)$$

Con respecto a las ecuaciones diferenciales que describen el comportamiento de las especies biológicas soportadas se tiene, para una especie genérica:

$$\frac{d}{dt}(VX_k^f) = VK_{nd}X_k + V\mu_k X_k^f - VK_{dd}X_k^f \qquad (50)$$

siendo K_{dd} el coeficiente global de "desprendimiento-decaimiento" de biofilm y K_{nd}

el coeficiente de deposición neta; ambos en d^{-1}. Por ejemplo, para un caso específico se puede adoptar:

$$K_{dd} = \beta K_k = 1.4 \qquad (51)$$

$$K_{nd} = 0.01 d^{-1} \qquad (52)$$

Si se incorporan las ecuaciones citadas, y se utilizan las constantes del ejemplo anterior, además de las últimamente referenciadas para el biofilm, se obtiene un modelo que al ser resuelto en forma similar a lo explicado para el caso anterior brinda la evolución de todas las variables en el tiempo. Por ejemplo, en la Fig. 17 se muestra el fenómeno de acumulación de biofilm en un CSTR. Un ejemplo de este tipo de análisis, reportado para sistemas aeróbicos con P. aeruginosa, puede verse en Characklis (1990).

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Andrews J. F., *Journal. Sanitary Engineering Division, Am. Soc. Civ. Eng.*, **95**, N° SAl, p. 95 (1969).

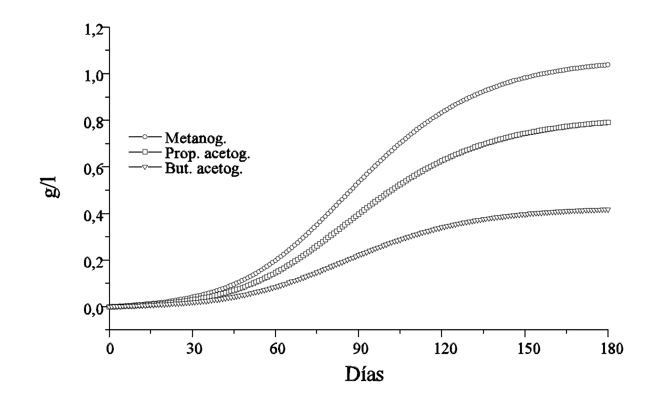


Figura XVIII.17 Progresión de la acumulación de biofilm

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Andrews J. F., "Dynamic model of the anaerobic digestion process", *J. San. Engng Div. Proc. Am. Soc. Civ. Eng SA* **1**, 95-116 (1971).
- Angelidaki I, L. Ellegaard and B. Ahring, "A mathematical model for dynamic simulation of anaerobic digestion of complex substrates: focusing on ammonia inhibition, *Biotechnology and Bioengineerig*, **42**, 159-166 (1993).
- Burh H. O. and J. F. Andrews, "The thermophilic anaerobic digestion process", *Water Research*, **11**, 129-143 (1977).
- Characklis, W.G.; K.C. Marshall (Ed), *Biofilms*, Wiley-Interscience publication, John Wiley & Sons, Inc. (1990).
- Froment G. and K. Bischoff; *Chemical Reactor Analysis and Design*, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York (1990).
- Heyes, R. H. and Hall R. J.; *Biotechnology Letters*; **3**, (8),431-436 (1981).
- Hill D. T.; "A Comprehensive Dynamic Model for Animal Waste Methanogenesis"; *Transactions of the ASAE*; American Society of Agricultural Engineers; 0001-2351/82/2505, pp.1374 (1982).
- Hill D. T. and C . L. Barth; "A fundamental approach to anaerobic lagoon analysis. *In: Procesing and management of agricultural waste*. Cornell Agricultural Waste Management Conference Proceedings (1974).
- Hill D. T and C. L Barth, "A dynamic model for simulation of animal waste digestion", *J. Wat. Pollut. Control Fed,.* **10**, 2119-2143 (1977).
- Ierusalimsky, N. D.; "Bottle-necks" in metabolism as growth rate controlling factors", in Microbial Physiology and continuos culture: Third International Symposium, E. O. Powell, C.G.T. Evans, R. E. Strange and D.W. Tempest, Eds. (Her Majesty's Stationery Office, London), pp. 23-33. (1967).
- Langmuir, I.; *J. Am. Chem.. Soc.*, **40**, 1361 (1918)
- Lawrence, A. L. and McCarty P. L.: Water Pollution Control Federation; **41**, 2, R1-R7 (1969).
- Levenspiel, O.; *Chemical Reaction Engineering*, 2nd ed., Wiley, New York (1972).
- Loehr, R. C.; Agricultural waste management; *Academic Press*, New York (1974).
- McInerney , M.; Bryant P. and Stafford D. A.; *Anaerobic Digestion*, Proceedings of the First International Symposium on Anaerobic Digestion; University College, Cardiff; Applied Science Publishers; London, 91-98 (1971).
- Michaelis, L; Menten M. L.; Biochemie, **49**, 333-369 (1913).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- Monod, J.; Recherches sur la Croissance des Cultures Bacteriennes, Hermann, Paris, 1942.
- Monod, J.; *Ann. Rev. Microbiol.*. **3**, 371-394 (1949)
- Mosey F. E.; "Mathematical Modelling of the Anaerobic Digestion Process: Regulatory Mechanisms for the Formation of Short-Chain Volatile Acids from Glucose"; *Wat. Sci. Tech.*; **15**, pp. 209-232 (1983).
- Rittmann B. E., "The effect of shear stress on biofilm loss rate", *Biotechnology and Bioengineering,* **24**, 501-506 (1982).
- Smith, P. H.; Studies of methanogenic bacteria in sludge. Completion Report N° EPA-600/2-80-093. National Technical Information Service, Springfield, VA 22161 (1980).
- te Boekhorst R. H; Ogilvie J. R.; Pos, J.; An overview of current simulation models for anaerobic digesters. *In: Livestock waste: A renewable resource.* R. J. Smith, ed. ASAE Publication N° 2-81. ASAE, St. Joseph, MI 49085 (1981).
- Wolfe, R. S.; Microbial biochemistry of methane - a study in contrasts. In: Microbial Biochemistry. J.R. Quayle, ed., **21**, University Park Press, Baltimore (1974).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XIX

MÉTODOS, ESTRUCTURAS Y MODELOS PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS BATCH

Por
Enrique Salomone

XIX.1 INTRODUCCIÓN

La simulación por computadoras ha sido largamente usada en el diseño, optimización y análisis de performance de procesos continuos. A medida que esta tecnología se hizo madura, fue incorporada en herramientas comerciales de uso extendido.

Sin embargo, para los procesos discontinuos el estado del arte es completamente diferente. Mientras que existe numerosa bibliografía atendiendo al problema de la simulación de etapas batch individuales, la simulación de procesos completos todavía se encuentra en un nivel de desarrollo mucho más incipiente.

La principal dificultad radica en la complejidad que introducen las relaciones entre las etapas habida cuenta de las características tan particulares que presentan los procesos batch desde el punto de vista de los estados no estacionarios, discontinuidades del flujo de material, las distintas políticas de operación posibles, etc.

En este capítulo se presenta una discusión introductoria acerca de los principales enfoques desarrollados hasta el momento para abordar problemas que requieren de la simulación de un proceso discontinuo.

En primer lugar, se caracterizan los procesos discontinuos introduciendo las definiciones y conceptos más importantes, luego se desarrollan modelos matemáticos de un proceso discontinuo en forma general, ilustrando su relación con modelos mecanicistas (basados en los primeros principios o ecuaciones de balance) de etapas batch individuales.

Por último se abordará el problema de la simulación, analizando las características de las distintas estrategias desde el punto de vista de su utilización para simular procesos batch.

XIX.2 EL ROL DE LOS PROCESOS BATCH EN LA INDUSTRIA QUÍMICA

El procesamiento discontinuo o batch es el modo de operación más antiguo que conoce la industria de procesos. Analizando el desarrollo de la ingeniería química de los últimos 30 años se puede concluir que el mayor esfuerzo se ha centrado en la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

transformación de los “viejos” procesos batch en modernos procesos continuos. Con esta perspectiva parece sorprendente encontrar hoy que una alta proporción del volumen de producción de sustancias químicas (y una proporción aún mayor si se analiza la participación económica) se realiza en plantas batch. Además, no hay evidencias de que esta tendencia decline (Parakrama, 1985, Rippin, 1993).

Existen productos para los cuales no es posible desarrollar procesos continuos confiables. En otros casos este desarrollo exige una demanda de tiempo y recursos prohibitiva. Sin embargo, muchos más productos que podrían ser manufacturados en plantas continuas se procesan de hecho en plantas batch por motivos económicos.

La producción batch se lleva a cabo usualmente en equipos relativamente estandarizados que pueden ser adaptados fácilmente y si es necesario reconfigurados para producir otros productos diferentes. Esto es particularmente útil para productos que se fabrican en pequeñas cantidades como los farmacéuticos, agroquímicos y otros químicos finos para los cuales la demanda anual puede ser satisfecha en unos pocos días o unas pocas bachadas en una planta existente.

Debido a la flexibilidad de los arreglos de producción, éstos procesos pueden absorber las fluctuaciones o cambios rápidos en la demanda que son características de estos productos. De esta manera se evitan las dificultades asociadas con el dimensionamiento de una planta dedicada innecesariamente pequeña.

Una de las tendencias más claras de la industria química es el creciente interés por los productos químicos finos, de alto valor agregado y alto contenido tecnológico. A este mercado se han agregado en los últimos años productos de origen bioquímico que se destacan por su corto ciclo de vida.

Otra característica de este sector es su estrecha relación con la innovación tecnológica y la habilidad para producir rápidamente cantidades comercializables de productos muy novedosos. Los procesos batch ofrecen una facilidad relativa para pasar de datos experimentales de escalas piloto a diseños industriales de manera más rápida y confiable.

Todos estos factores han movilizado el interés por el desarrollo de técnicas eficientes para el diseño, planificación y operación de plantas químicas batch. Al igual que con los procesos continuos, la simulación es una herramienta importante para asistir en estos problemas.

XIX.3 APLICACIÓN DE LA SIMULACIÓN EN LA INGENIERÍA DE PROCESOS BATCH

La simulación de un proceso puede ser usada en distintos problemas que tienen distintos niveles de complejidad. Estos problemas pueden ser ordenados en una estructura jerárquica como se esquematiza en la figura 1.

El nivel más bajo de complejidad consiste en el uso de la simulación para la predicción de las condiciones operativas del proceso. En este nivel la simulación se aproxima al comportamiento de las fenómenos físicos que ocurren en el proceso y

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

actúa como un emulador del proceso. Típicas respuestas de estas simulaciones son: conversión final en una reacción, rango de presiones de trabajo, recuperación obtenida en una etapa de purificación, etc.

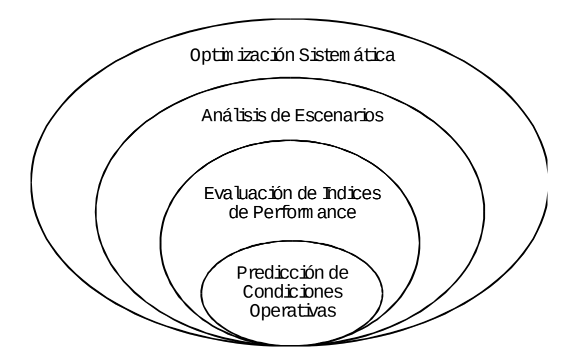


Figura XIX.1: Aplicación de la simulación de procesos.

Con un nivel de complejidad mayor se puede ubicar al uso de la simulación como herramienta de evaluación de índices de performance. Aquí no solamente interesa emular la física del proceso sino evaluar los resultados del mismo en términos de algún índice adecuado. Típicamente se puede usar simulaciones para evaluar la productividad, los tiempos de respuesta, el consumo de recursos, los costos asociados a la producción, rendimientos, etc.

Un paso más en complejidad lo constituye el análisis de distintos escenarios. Este tipo de problema incluye a los anteriores y agrega la tarea de identificar y agrupar variables "clave" que tienen impacto en el índice de performance, manejándolas como datos de entrada. De esta manera, el simulador del proceso se transforma en una función implícita de dichas variables que da por resultado el índice de performance correspondiente al escenario actual.

Las variables clave pueden ser "parámetros variables" externos al proceso o bien "variables manipulables" internas del proceso. En este último caso, dichas variables constituyen grados de libertad que pueden usarse para mejorar la performance y se denominan variables de decisión. Para encontrar "el mejor" valor de las variables de decisión valiéndose de la simulación es necesario agregar un nuevo nivel de complejidad: la optimización. El algoritmo de optimización comanda la generación de nuevos valores para las variables de decisión y la función objetivo a optimizar es el índice de performance provisto por el simulador.

XIX.4 CARACTERÍSTICAS DE LOS PROCESOS BATCH

Los procesos de la industria química pueden ser clasificados en continuos o batch. En un proceso continuo, los materiales pasan a través de unidades

especializadas de procesamiento para terminar convertidos en productos finales. Cada una de estas unidades opera en estado estacionario y realiza una función de procesamiento dedicado. Tantos los ingresos de materiales como la salida de productos son flujos continuos de materiales.

Un proceso batch, en cambio, consiste en una secuencia de pasos que deben ser realizados en un orden definido. La culminación de esta secuencia de pasos produce una cantidad finita de producto final. Esta cantidad finita es lo que se denomina bachada. Si la cantidad requerida de producto es mayor que esta cantidad, la secuencia debe ser repetida. Los procesos batch son esencialmente discontinuos y los materiales se procesan por lotes. En general cada unidad opera en estado no estacionario.

Existen dos tipos básicos de unidades en un proceso de esta naturaleza:

- Unidades batch
- Unidades semicontinuas

Una unidad batch propiamente dicha consiste en un recipiente donde los materiales a procesar son cargados, sometidos a algún tipo de procesamiento y luego descargados. Es decir que básicamente son unidades de contención con alguna capacidad de procesamiento. El caso más simple lo constituyen las *unidades de almacenamiento* donde los materiales no sufren ninguna transformación sino que son sencillamente alojados durante algún tiempo. En el otro extremo están las unidades donde varias tareas se conforman en una única unidad de contención. Un ejemplo clásico de este tipo de unidad es el reactor agitado y encamisado, donde un mismo recipiente de contención puede realizar las tareas de mezclado de reactivos, calentamiento, reacción y enfriamiento. En general, una *unidad batch de procesamiento* tendrá asociado un tiempo de procesamiento necesario para llevar a cabo la tarea.

Una *unidad semicontinua* es un equipo continuo que opera en forma intermitente transfiriendo el material entre dos unidades batch. Ejemplos de este tipo de unidad son las bombas y transportadores. Algunas unidades semicontinuas, además de transferir el material producen algún tipo de procesamiento. Este es el caso de filtros, mezcladores estáticos, intercambiadores de calor, centrífugas, etc. Es común también encontrar trenes de varias unidades semicontinuas en serie operando entre dos unidades batch.

En la figura 2, se representa un proceso batch típico donde pueden observarse los tipos de unidades anteriomente mencionados.

Una planta batch pude ser usada para fabricar un único producto. Ejemplos de este tipo de plantas pueden ser encontrados en la industria farmoquímica, en la síntesis de intermediarios y algunos productos de fermentación y reciben el nombre de *monoproducto*. En estas plantas, la secuencia de tareas se repite una y otra vez en forma cíclica formando una *campaña* de producción.

Es mas difundido todavía el uso de instalaciones batch para la fabricación de varios productos. En este caso se pueden distinguir dos arreglos distintos: las plantas

multiproducto y las plantas *multipropósito.*

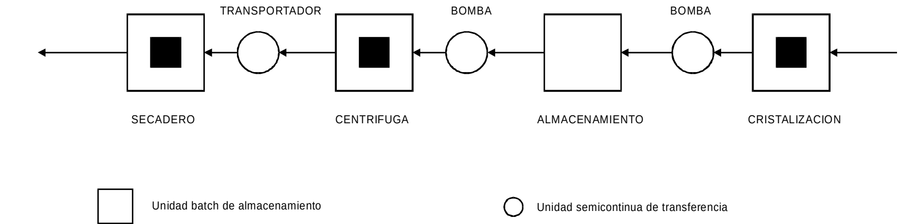


Figura XIX.2: Un típico proceso batch.

En una planta multiproducto, todos los productos siguen la misma secuencia de procesamiento a través de las mismas unidades. Su aplicación esta centrada en la producción de familias de productos. Por ejemplo: producción de pinturas, polímeros de distinto grado, etc. Normalmente, estas plantas operan en campañas monoproducto, es decir, se procesan varios ciclos de un producto (una campaña), se acondicionan las unidades para el siguiente producto y se procesan varios ciclos de dicho producto, y así sucesivamente.

La planta multipropósito por otra parte, consiste en una batería de unidades que son asignadas para procesar un producto determinado y una vez finalizada la producción de éste pueden ser reasignadas para otro producto en una secuencia diferente. A diferencia de las plantas multiproducto, cada producto sigue una receta de fabricación diferente y en distintos momentos puede incluso ser procesado en diferentes unidades. Estas plantas son las más flexibles y su operación esta basada en *órdenes de producción* que van definiendo los arreglos productivos. Esto requiere un importante esfuerzo de planificación, cronogramación de tareas y asignación de recursos.

Cualquiera sea el tipo de planta, toda vez que la cantidad de producto obtenido al finalizar una secuencia es insuficiente, dicha secuencia se repite cíclicamente hasta cumplimentar la cantidad requerida. La manera en que estos ciclos son conducidos da lugar a dos modos distintos.

En el primer modo una bachada deber ser procesada completamente antes de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

que la nueva bachada pueda empezar a ser procesada. Esto se conoce como operación *sin solapamiento de bachadas*. En consecuencia en todo momento hay una única bachada siendo procesada y por lo tanto una única etapa ocupada.

En el segundo modo, llamado *con solapamiento de bachadas*, se permite que una etapa que ya está desocupada comience a operar con una nueva bachada antes que la anterior finalice su procesamiento. De esta manera habrá más de una bachada procesándose y por lo tanto más de una unidad operando simultáneamente. Esta diferencia en la forma de operación se ilustra en la figura 3.

Como se puede apreciar en el diagrama de Gantt (a), la bachada #1 es procesada secuencialmente en las unidades 1, 2 y 3. La bachada #2 comienza a procesarse en la unidad 1 sólo cuando la unidad 3 terminó de procesar la bachada #1. Nótese que en todo momento mientras una bachada esta siendo procesada en una unidad, las demás unidades permanecen ociosas.

En el diagrama (b) correspondiente al modo de operación con solapamiento de bachadas se puede observar que la bachada #2 comienza a procesarse en la unidad 1 mientras la bachada #1 esta siendo procesada por la unidad 2.

Cuando una secuencia de operaciones se repite en forma cíclica aparece el concepto de *tiempo de ciclado*, que se define como el tiempo transcurrido entre la finalización de dos bachadas consecutivas. Este tiempo en general será distinto del *tiempo total de procesamiento* de una bachada, esto es, del tiempo transcurrido desde que se empieza a procesar una bachada hasta que culmina su procesamiento.

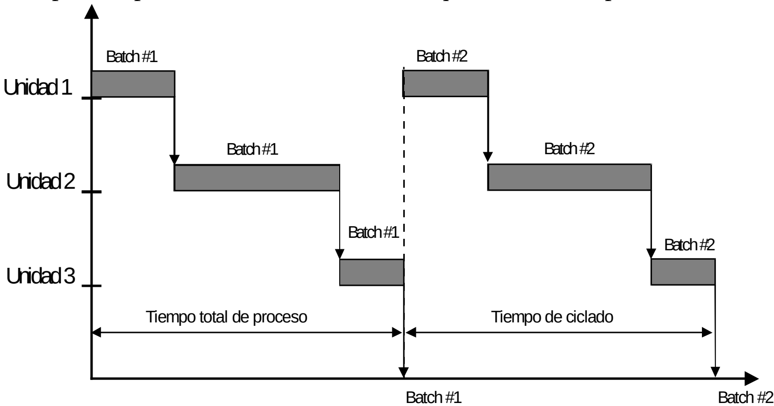


Figura XIX.3a. Modo de operación sin solapamiento de bachadas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

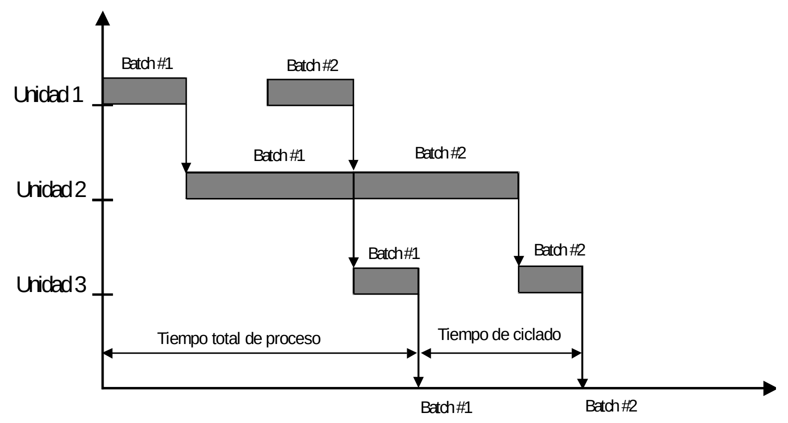


Figura XIX.3b: Modo de operación con solapamiento de bachadas

El tiempo de ciclado depende del modo de solapamiento de bachadas y de la política de transferencia de bachadas entre etapas. Existen tres reglas de transferencia que determinan la manera en que una bachada es transferida desde una etapa donde ya finalizó su procesamiento a la que le sigue en la secuencia.

1. *Tiempo de espera nulo*

Una etapa que opera bajo esta regla de transferencia, una vez finalizado su procesamiento debe transferir inmediatamente el material a la etapa siguiente. No se permite demora entre la finalización del procesamiento y el comienzo del procesamiento en la etapa posterior. Esto indica claramente que no existe almacenamiento intermedio entre estas etapas y que obliga a la etapa posterior a estar desocupada cuando se finaliza el procesamiento en la etapa anterior. Esta regla se conoce como *ZW* (del inglés: zero wait).

2. *Sin almacenamiento intermedio*

En este caso tampoco existe capacidad de almacenamiento intermedio entre las etapas en cuestión pero se permite que la etapa anterior retenga el material después de finalizar el procesamiento hasta que se desocupe la etapa siguiente y el material pueda ser transferido. Es decir que la misma unidad de procesamiento sirve de almacenamiento temporal. De esta manera los tiempos de inicio de estas etapas pueden desincronizarse. Esta regla se conoce como *NIS* (del inglés: non intermediate storage).

3. *Con almacenamiento intermedio*

Esta regla implica la existencia de una capacidad de almacenamiento entre las etapas en cuestión. Cuando una etapa termina su procesamiento, el material es transferido a una unidad de almacenamiento y queda libre para volver a operar. Por

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

su parte, cuando la etapa siguiente esta lista para operar toma el material de la unidad de almacenamiento.

La introducción de almacenamiento intermedio permite desincronizar los tiempos de inicio de ambas etapas y desacoplar los tamaños de bachada y por ende el ritmo de ciclado. Por ejemplo una etapa puede estar procesando una bachada de 100 kg cada 1 hora transfiriendo el material producido a la unidad de almacenamiento. La etapa siguiente puede estar procesando 10 kg cada 0.1 hora (ciclando 10 veces mas rápido con una carga 10 veces menor) y aún así no habrá acumulación a largo plazo en la unidad de almacenamiento intermedio.

La introducción de una unidad de almacenamiento divide al proceso en subprocesos que en general tendrán distintos tamaños de bachada y tiempo de ciclado. La capacidad de dicho almacenamiento introduce una subclasificación de esta regla de transferencia:

a) *Almacenamiento ilimitado*: esto supone la existencia de una capacidad de almacenamiento lo suficientemente grande como para que los subprocesos ‘aguas arriba’ y ‘aguas abajo’ estén completamente desacoplados. Cada subproceso puede trabajar con su propio tamaño de bachada y tiempo de ciclado sin restricciones. Esta política producirá acumulación de material del orden del tamaño de una campaña.

b) *Almacenamiento sin acumulación a largo plazo*: aquí también se supone la existencia de una capacidad de almacenamiento como para que cada subproceso pueda trabajar con su propio tamaño de bachada y tiempo de ciclado pero restringido a que ambos operen con la misma ‘velocidad de producción’ promedio. Esto es, la relación tamaño de bachada / tiempo de ciclado debe ser la misma en los dos subprocesos. Esta condición elimina la posibilidad de acumulación en el largo plazo y la capacidad requerida será del orden del tamaño de bachada.

c) *Almacenamiento limitado*: en este caso, la capacidad de almacenamiento intermedio es menor que la necesaria para el caso anterior, lo que implica que el tamaño de bachada y tiempo de ciclado de ambos subprocesos además de cumplir la condición de igual velocidad de producción promedio, deberá cumplir restricciones de sincronización de manera de no sobrepasar en ningún momento la capacidad de almacenamiento disponible.

XIX.5 MODELOS DE TIEMPOS Y FACTORES DE REQUERIMIENTO

La descripción mas sencilla de un proceso batch es la receta de procesamiento. En ella se enumeran ordenadamente la secuencia de *tareas* que deben realizarse para obtener el producto final. Algunas de estas tareas pueden agruparse para ser llevadas a cabo en la misma *unidad* batch. Finalmente una *etapa* batch esta

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

constituida por una o varias unidades batch operando en paralelo.

Las relaciones entre los tamaños de las unidades y los tiempos de procesamiento se pueden establecer con una descripción analítica que se describe a continuación.

El tamaño del lote o bachada, B_i se define como la cantidad de producto final i obtenido al completar la secuencia de tareas. Surge inmediatamente que las tareas intermedias tendrán tamaños de carga diferentes de B_i, de acuerdo a los balances y rendimientos materiales de cada una.

Para cada producto i en cada etapa j, es posible definir un *factor de tamaño*

$$V_{ij} = S_{ij} B_i \; i = 1,2,\ldots,I \; j = 1,2,\ldots,J \quad \textbf{(1)}$$

S_{ij} como la capacidad V_{ij} de dicha etapa necesaria para procesar la cantidad B_i del producto i:

$$V_j = \max_i \{V_{ij}\} \qquad j = 1,2,\ldots,J \quad \textbf{(2)}$$

El tamaño para la etapa j debe ser tal que:

Además, cada producto i tiene asociado un tiempo de procesamiento p_{ij} en cada etapa j.

Análogamente, cada unidad semicontinua k, se caracteriza por una *velocidad de procesamiento* R_k, y un *factor de carga* D_{ik}, de manera que el *tiempo de operación* para procesar el lote B_i en esa unidad se expresa:

$$\theta_k = \frac{D_{ik} B_i}{R_k} \qquad k = 1,2,\ldots K \quad \textbf{(3)}$$

Análogamente a los factores de tamaño y carga, que definen los requerimientos de capacidad de procesamiento por unidad de producto producido, también se pueden definir factores de requerimientos de materias primas, energía eléctrica, vapor y otros servicios como consumos específicos.

El tiempo que una unidad batch j esta ocupada procesando el producto i depende tanto de su tiempo de procesamiento p_{ij} como de los tiempos de operación de las unidades semicontinuas que la cargan y descargan:

$$T_{ij} = \theta_{ic} + p_{ij} + \theta_{id} \quad \textbf{(4)}$$

donde la unidad semicontinua c es la que opera cargando la unidad batch j y la unidad semicontinua d la que la descarga. La unidad batch j que comienza a procesar una bachada del producto i no estará lista para procesar una nueva bachada hasta que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

transcurra un el tiempo T_{ij}. Por esta razón este tiempo se conoce como el tiempo de ciclado mínimo de la etapa *j* para producir el producto *i*.

Para disminuir el tiempo de una etapa, se suelen disponer mas de una unidad en paralelo operando desfasadamente. Esto es, dos o más equipos asignados a la misma etapa, comienzan su operación alternativamente a tiempos diferentes. Si m_j es el número de unidades iguales que operan en paralelo en la etapa *j*, el tiempo de ciclado mínimo viene dado por la siguiente expresión:

$$T_{ij}=\frac{\theta_{ic}+p_{ij}+\theta_{id}}{m_j} \qquad (5)$$

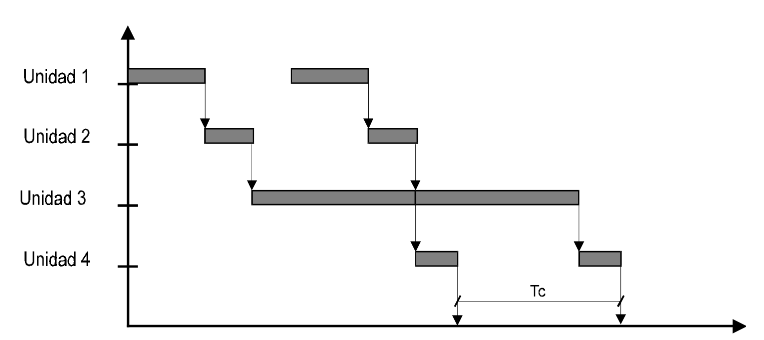


Figura XIX.4a: Operación sin unidades en paralelo

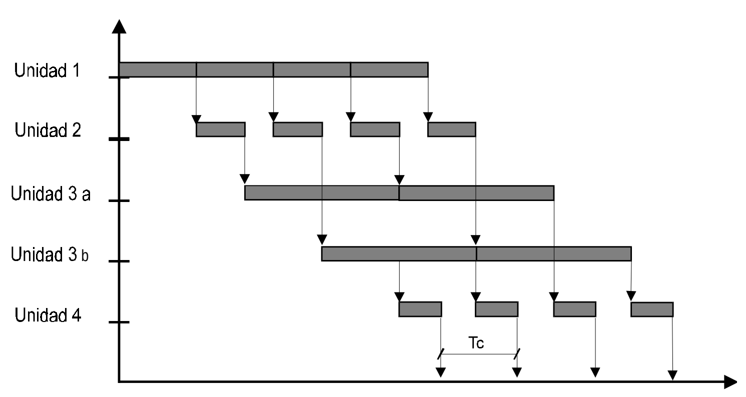


Figura XIX.4.b: Operación con unidades en paralelo

Este situación se ilustra en la figura 4. En el diagrama (b) la etapa 3 de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

procesamiento se realiza usando 2 unidades (unidades 3a y 3b) operando en paralelo y fuera de fase. De esta manera las bachadas que finalizan su procesamiento en la unidad 2 se procesan alternativamente en las unidades 3a y 3b.

Así como existe este tiempo para cada etapa *j*, también se puede definir un tiempo de ciclado mínimo del producto *i* para el proceso, Tc_i. Este tiempo dependerá del modo de solapamiento con que opera el proceso y de las reglas de transferencia de las bachadas entre las etapas. Como se dijo anteriormente, la existencia de capacidad de almacenamiento intermedio permite que cada subproceso adopte su propio tiempo de ciclado y por lo tanto desde el punto de vista del cálculo del tiempo de ciclado se consideran como procesos independientes. Esta situación se ilustra en la figura 5.

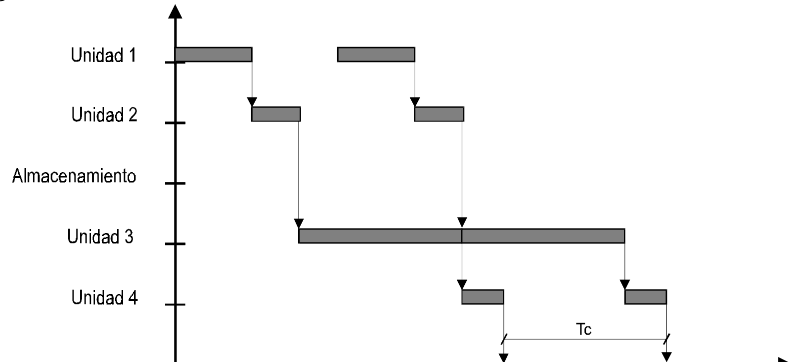


Figura XIX.5a: Operación sin almacenamiento intermedio

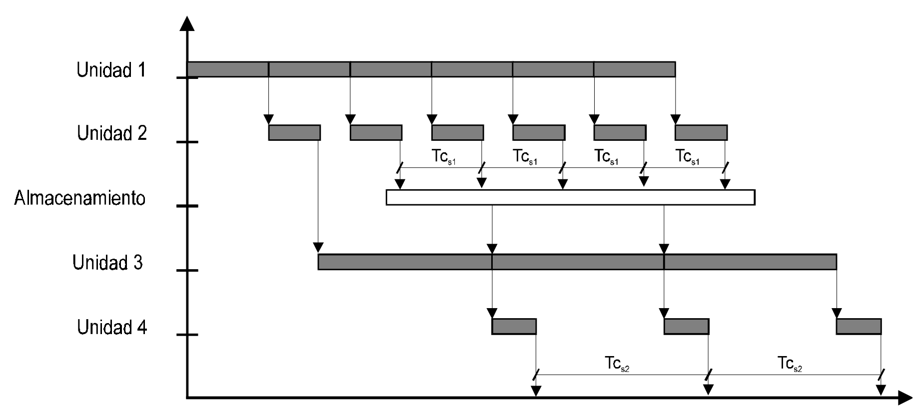


Figura XIX.5b: Operación con almacenamiento intermedio

En el diagrama (b) se puede apreciar que cuando la segunda bachada finaliza su procesamiento en la unidad 2, es transferida a almacenamiento. Cuando la unidad

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

3 termina de procesar la primer bachada, acepta una nueva carga proveniente del almacenamiento.

Para un subproceso cuyas etapas transfieren con reglas ZW o NIS, sin solapamiento de bachadas, el tiempo de ciclado mínimo coincide con el tiempo de residencia de una bachada en dicho subproceso y por lo tanto es igual a la suma de los tiempos de procesamiento de todas las etapas batch:

$$Tc_i = \sum_{j=1}^{J} T_{ij} \qquad \textbf{(6)}$$

Para un subproceso cuyas etapas transfieren con reglas ZW o NIS, con solapamiento de bachadas, el tiempo de ciclado mínimo queda determinado por la etapa de procesamiento más larga:

$$Tc_i = \max_{j \in J,\ k \in K} \left\{ T_{ij}\ ;\ \theta_k \right\} \qquad \textbf{(7)}$$

El conjunto de ecuaciones (1)-(7) presentado constituye un modelo matemático sencillo de un proceso batch. Dicho modelo posee un grado de abstracción tal que las etapas son simplemente descriptas por un factor de tamaño y un tiempo de procesamiento constantes.

Un modelo de esta naturaleza es útil para decidir aspectos estructurales como la asignación de tareas a equipos, coordinación de los ciclos de operación y la provisión de almacenamiento intermedio y/o duplicación de unidades en paralelo en una etapa. No obstante para describir el comportamiento de los procesos que se llevan a cabo en cada etapa es necesario incrementar el grado de detalle de la descripción, modelando a los fenómenos físicos que se producen en cada etapa. Normalmente, estos modelos mas detallados se derivan de los primeros principios, explicitando los balances de materia y energía, los equilibrios termodinámicos, las cinéticas y los fenómenos de transporte.

XIX.6 MODELO DE ETAPAS INDIVIDUALES BASADOS EN LOS PRIMEROS PRINCIPIOS

Se presentarán a modo de ejemplo dos modelos de etapas individuales: uno para una etapa batch y otro para una etapa semicontinua. El propósito de estos ejemplos es ilustrar la modelación de estas etapas desde el punto de vista de primeros principios y mostrar su relación con el modelo anterior.

Ejemplo 1: modelo de una fermentación fed-batch

En una fermentación operada de manera fed-batch, el sustrato (materia prima de la fermentación) va siendo agregado a medida que la fermentación progresa. Esto

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

da lugar a varias políticas de agregado de dicho sustrato. En este ejemplo se considera que el sustrato es agregado de manera de mantener constante la concentración del mismo en el fermentador. Este modo de operación implica que el volumen de fermentación cambia con el tiempo.

Se considera que el crecimiento del microorganismo es descripto por una cinética de tipo Contois y es función de la concentración de sustrato *s* y de biomasa *x* (equivalente a un modelo Monod pero donde la constante de saturación es una función lineal de la concentración de biomasa). Sea la velocidad especifica de crecimiento μ [1/hr]:

$$\mu(s\,,\,x) = \frac{(\mu_m\ s)}{(s + K_1\ x)}$$

El producto es formado a una velocidad específica θ[kg producto/kg biomasa-hr] determinada por una cinética de inhibición por sustrato:

$$\theta(s) = \frac{\theta_m}{\left(1 + \frac{K_p}{s} + \frac{s}{K_i}\right)}$$

El consumo de sustrato debido al crecimiento del microorganismo y la formación de producto es proporcional a las correspondientes velocidades a través de rendimientos constantes: Y_x e Y_p . El mantenimiento de las células también requiere un consumo de sustrato que es tenido en cuenta por una demanda específica constante M_x.
Se considera además que el producto se degrada con una cinética de primer orden, cuya constante de decaimiento es *D*.

El sustrato se agrega al fermentador con una velocidad *F* (variable en el tiempo), y se considera que la agitación se suministra de manera de mantener un valor constante de potencia por volumen *PPV*, de manera que el consumo de energía eléctrica cambia durante la operación a medida que cambia el volumen.
Con estas consideraciones el modelo dinámico para la fermentación fed-batch se resume en las siguientes ecuaciones. (San y Stephanopoulos, 1989)
balance de materia para el microorganismo:

$$\frac{dx}{dt} = \mu(s\,,\,x)\ x - F\ \frac{x}{V}$$

balance de materia para el sustrato:

$$\frac{ds}{dt} = \frac{F}{V}\,(s_0 - s) - \theta(s)\ \frac{x}{Y_p} - \mu(s\,,\,x)\ \frac{x}{X_p} - M_x\ x$$

balance de materia para el producto:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\frac{dP}{dt} = \theta(s)\ x - K\ P - F\ \frac{P}{V}$$

acumulación de volumen:

$$\frac{dV}{dt} = F$$

x	concentración de biomasa [kg/m^3]
s	concentración de sustrato [kg/m^3]
P	concentración de producto [kg/m^3]
V	volumen de la bachada [m^3]
F	caudal de alimentación de sustrato[m^3/hr]
$s0$	concentración de sustrato alimentado [kg/m^3]
E	consumo de energía eléctrica [kW-hr]
PPV	potencia de agitación por volumen [kW/m^3]

El consumo de sustrato C [kg] puede ser calculado integrando:

$$\frac{dC}{dt} = F\ s_0$$

y el consumo de vapor H [kg de vapor] para esterilización de la alimentación, viene expresado por:

$$H = \frac{\rho_l\ V_{final}\ cp_l\ \Delta T_l}{\lambda^v}$$

donde:

ρ_l	densidad de la alimentación [kg/m^3]
cp_l	calor específico de la alimentación [kcal/kg ºC]
ΔT_l	diferencia de temperaturas durante la esterilización [ºC]
λ^v	calor de vaporización del vapor [kcal /kg]

Las relaciones entre este modelo y el modelo de tiempos y factores de requerimiento son las siguientes:

tamaño de bachada producido:	$\boldsymbol{B = V(t_f)\ P(t_f)}$
factor de tamaño:	$\boldsymbol{S_{fer} = V(t_f) / B}$
tiempo de procesamiento:	$\boldsymbol{p_{fer} = t_f}$
consumo específico de energía:	$\boldsymbol{u_e = E(t_f) / B}$
consumo específico de vapor:	$\boldsymbol{u_v = H / B}$
consumo específico de sustrato:	$\boldsymbol{u_{mp} = C(t_f) / B}$

(donde t_f es el tiempo final de la fermentación)

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Ejemplo 2: modelo de una extracción líquido- líquido semicontinua

Se considera un extractor líquido-líquido que opera en contracorriente, contactando una corriente de alimentación con una de solvente. El balance global de materia se puede expresar:

$$F\ x_{\in}\ +\ S\ y_{\in}\ =\ F\ x_{out}\ +\ S\ y_{out}$$

F	caudal de alimentación [m^3/ hr]
S	caudal de solvente [m^3/ hr]
x	concentración de soluto en alimentación [kmol soluto / m^3]
y	concentración de soluto en solvente [kmol soluto / m^3]

el extractor tiene *N* etapas teóricas de equilibrio y en cada etapa las composiciones de equilibrio están relacionadas a través de un coeficiente de distribución *m*, que se supone constante:

$$y\ =\ m\ x$$

Si se considera el caudal de ambas corrientes constante a lo largo de las etapas, se puede obtener una expresión analítica que relaciona las composiciones de entrada y salida (Belter et al.,1988):

$$x_{out}\ =\ \frac{E-1}{E^{N+1}\ -\ 1}\ x_{\in}$$

donde E es el coeficiente de extracción definido como sigue:

$$E\ =\ \frac{m\ S}{F}$$

la capacidad del extractor queda definida por el caudal volumétrico total:

$$R_{ex}\ =\ S\ +\ F$$

El consumo de energía eléctrica se puede estimar aproximando la demanda de potencia del extractor como función de la capacidad:

$$P\ [kW]\ 2\ R_{ex}^{1/2}$$

Considerando que el extractor opera durante un tiempo θ,_ las relaciones entre este modelo y el modelo de tiempos y factores de requerimiento son las siguientes:

tamaño de bachada producido:	$\boldsymbol{B\ = S\ y_{out}\ M_i\ \theta}$
factor de carga:	$\boldsymbol{D_{ex} = R_{ex}\ \theta\ /\ B}$
tiempo de procesamiento:	$\boldsymbol{\theta_{ex} = \theta}$
consumo específico de energía:	$\boldsymbol{u_e\ = P\ \theta\ /\ B}$
consumo específico de solvente:	$\boldsymbol{u_{mp}\ = S_\rho_s_\theta\ /\ B}$

donde:

Autor: Nicolás J. Scenna y col.
ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

M_i es el peso molecular del soluto [kg/kmol]
ρ_s es la densidad del solvente [kg/m^3]

Un aspecto importante de cualquier modelo es que sólo refleja en forma precisa aquello que es relevante a la actividad para lo cual es desarrollado. En el caso del modelo de tiempos y factores de requerimiento, el énfasis esta puesto en la descripción del proceso a nivel las relaciones entre las etapas. La información relativa a los procesos físicos que ocurren en cada etapa es encapsulada en los factores de requerimiento. En estos ejemplos se ilustra como se vinculan modelos de etapas individuales, desarrollados teniendo en cuenta los fenómenos físicos que se llevan a cabo en cada etapa con los factores de requerimiento en los que está basado el modelo del proceso explicado anteriormente. Es decir, cómo utilizar módulos de simulación de operaciones batch para implementar modelos del proceso completo.

Si bien el desarrollo de modelos matemáticos con el grado de detalle apropiado al problema es fundamental para efectuar simulaciones, el marco o sistema en el cual dichos modelos son organizados y resueltos también constituye un aspecto clave. En las secciones siguientes analizaremos las características más importantes de los distintos enfoques que se han desarrollado.

XIX.7 LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN

En su definición más amplia, la simulación de un proceso consiste en la resolución por computadora de un modelo matemático que describe su comportamiento a través de variables que determinan su estado. En base a las características de dichas variables de estado es posible clasificar a los sistemas de simulación en dos tipos claramente diferenciados:

- Simulación de un sistema continuo
- Simulación de un sistema discreto

Simulación de sistemas continuos

En un sistema continuo, las actividades del sistema provocan cambios graduales de las variables de estado. Cuando se modelan matemáticamente, dichas variables son controladas por funciones continuas. Típicamente, las variables de dichos sistemas siguen trayectorias continuas en el caso de procesos no estacionarios o adoptan un valor estacionario.

Generalmente un simulador de esta naturaleza es diseñado para representar procesos con estructuras fijas, que involucran flujos continuos de material, y cuyas unidades se describen mediante ecuaciones algebraicas y diferenciales. Están organizados en forma de sub-modelos o módulos: las ecuaciones de diseño y balance de materia y energía que representan cada unidad del proceso se reúnen en módulos separados que se ejecutan en una secuencia especificada como pasos de cálculo a lo largo del diagrama de flujo del proceso. Un módulo de proceso puede representarse como se muestra en la figura 6.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

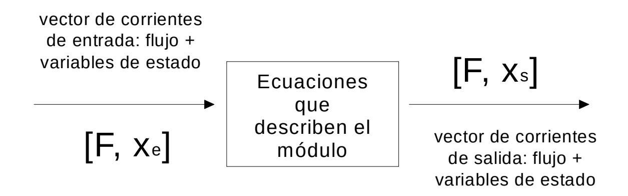


Figura XIX.6: Un módulo de proceso.

Cuando aparecen reciclos de material, no es posible resolver la secuencia de unidades en forma directa y se recurre a técnicas de rasgado del ciclo de corrientes y a métodos de convergencia. Esta situación se esquematiza en la figura 7.

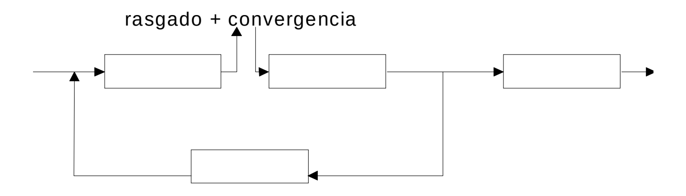


Figura XIX.7: Proceso con reciclos

Este tipo de estrategia de simulación ha sido extensivamente usado para estudiar el estado estacionario y el comportamiento dinámico (transientes entre estados estacionarios) en procesos químicos continuos. Es importante observar que en estos simuladores, el tiempo como variable física carece de relevancia y sólo interesan las diferencias de tiempo. Por ejemplo, el tiempo transcurrido entre dos estados estacionarios durante un transiente o el tiempo de residencia medio del material en una unidad. Dado que las variables de estado varían en forma continua, no existe un instante que pueda particularizarse y distinguirse del inmediato anterior o posterior en algo más que una cuestión de grado. Es decir, no existe el concepto de "evento".

En resumen, un simulador que utiliza modelos continuos posee la siguientes características:

- Las variables de estado son continuas.
- Las unidades fundamentales son subprocesos que se organizan generalmente en forma modular, con cada módulo representando una unidad del proceso.
- La estructura del proceso es invariable.
- La secuencia de cálculo está determinada por el flujo de materiales y se conoce a priori.
- Cada módulo resuelve las ecuaciones algebraicas y diferenciales que relacionan las variables de estado en las corrientes de entrada y salida.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- El tiempo no constituye una variable fundamental y no existe el concepto de evento.

Simulación de sistemas discretos

En un sistema discreto, las actividades del sistema provocan cambios discretos del valor de las variables de estado. Típicamente, estos cambios se producen en instantes particulares de tiempo denominados *eventos*. Una descripción del estado de un sistema de esta naturaleza incluye además de los valores de las variables, los posibles cronogramas de eventos.

Un modelo de un sistema de eventos discretos se construye en base a tres elementos:

- las variables de estado
- los eventos que cambian dichas variables
- la relación entre los eventos

La relación entre eventos puede esquematizarse como se muestra en la Figura 8:

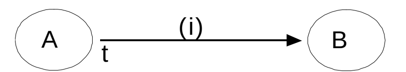


Figura XIX.8: Relación entre eventos

El esquema anterior indica que cada vez que ocurre el evento **A**, si la condición **(i)** es verdadera, el evento **B** se cronograma para que ocurra **t** minutos más tarde.

De esta manera, el sistema es representado a través de una red de eventos relacionados. En todo momento existe una lista de eventos cronogramados. La ocurrencia de un evento cambia el valor de las variables de estado y modifica la lista de eventos futuros. Esto es comandado por un algoritmo principal de cronogramación de eventos, según se esquematiza en la Figura 9.

Este tipo de simuladores ha sido largamente utilizado para investigar los efectos de distintas reglas de cronogramación ("scheduling") sobre la capacidad de las colas e inventarios en aplicaciones tales como sistemas de manufactura, sistemas de tráfico, redes de comunicación, etc. Usualmente estos sistemas tienen comportamientos estocásticos y la información de entrada está compuesta por distribuciones temporales y los resultados de la simulación son valores promedio.

En resumen, un simulador de eventos discretos posee la siguientes características:

- Las unidades fundamentales son "eventos" que se encuentran cronogramados en una lista ("schedule").
- La ocurrencia de un evento cambia las variables de estado en forma discreta

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

y puede alterar la lista de eventos futuros.
- La estructura del sistema es variable y la secuencia de cálculo no está determinada a priori.
- Son especialmente diseñados para manejar información estocástica en forma de distribuciones de entrada y resultados promedio.
- El comportamiento del sistema entre dos eventos es ignorado.

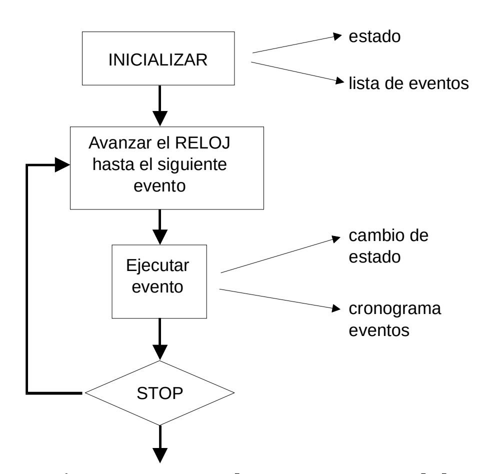


Figura XIX.9: Algoritmo principal de una simulación de eventos discretos.

XIX.8 CARACTERIZACIÓN DE UN PROCESO QUÍMICO DISCONTINUO (DESDE EL PUNTO DE VISTA DE LOS SISTEMAS DE SIMULACIÓN)

En la sección anterior se discutieron las características más importantes de dos sistemas o estrategias de simulación. Aquí nos proponemos ubicar a los procesos químicos discontinuos en el marco de dichas características.

En un proceso discontinuo o batch existirán en general etapas que operan de manera discontinua y otras en forma semicontinua. La operación del proceso está gobernada por un cronograma de actividades/tareas ("schedule") que define los eventos de inicio y finalización de cada tarea y el orden en que se ejecutan. Por esta razón, en un proceso discontinuo típico, la idea de eventos cronogramados es muy familiar. De hecho la descripción más sencilla de un proceso batch consiste justamente en una "receta" que lista las tareas a realizar, especifica el orden en que dichas tareas se realizan y se detallan los tiempos de procesamiento ó las condiciones que dan por terminada cada tarea. Cada inicio o finalización de una tarea está claramente asociada a un momento en el tiempo y el concepto de evento surge naturalmente. Además, en estos procesos existen variables de estado continuas que en cada evento sufren cambios discretos y variables naturalmente discretas.

Sin embargo, entre eventos (típicamente durante una tarea) se llevan a cabo

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

procesos continuos no estacionarios. Es decir, existen variables de estado que evolucionan según una trayectoria continua y que es importante tener en cuenta. Desde este punto de vista, la naturaleza de un proceso químico discontinuo requiere tanto el concepto de eventos discretos como el de trayectorias continuas. Esta naturaleza dual discreta/continua de las operaciones batch fue muy claramente descrita por Joglekar y Reklaitis (1984).

XIX.9 SIMULACIÓN CONTINUA-DISCRETA COMBINADA

La simulación Continua-Discreta combinada es una técnica que combina las características de ambos sistemas. Este tipo de simulación requiere de la solución de una *secuencia* de problemas de valor inicial, cada uno de ellos descriptos por un conjunto de ecuaciones diferenciales algebraicas no lineales con variables continuas. Esta secuencia está delimitada por eventos instantáneos que ocasionan algún tipo de cambio discreto al problema que esta siendo resuelto. Estos cambios pueden ser tanto en el valor de las variables o en la *forma funcional del modelo matemático continuo*.

Como consecuencia de esto, el dominio temporal de interés es particionado en subdominios continuos. Los límites de estos intervalos (definidos por el cronograma de eventos) pueden ser *explícitos* (ocurren en un momento pre-establecido) o bien estar *implícitamente* especificados a través de condiciones en las variables del modelo. Básicamente, la estructura de un simulador de este tipo se representa en la figura 10.

Luego de efectuada la inicialización, que consiste en el establecimiento de la lista ordenada de eventos cronogramados (calendario de eventos), se establece el vector de variables de estado y el conjunto de ecuaciones algebraico-diferenciales correspondientes al período continuo en cuestión, procediéndose a la integración del sistema resultante hasta la detección del próximo evento. Una vez detectado el evento, el control se transfiere a un bloque de procesamiento de eventos que producirá una revisión del vector de estado y el conjunto de ecuaciones seguido de una actualización del calendario de eventos. Luego se re-inicializa el nuevo sistema continuo a integrar y se procede hasta la detección del próximo evento.

Una cuestión que surge claramente de este esquema, es la complejidad que introducen las interacciones entre las variables continuas y los eventos discretos. Estas interacciones son fundamentalmente de tres tipos:

- Un evento discreto puede causar un cambio discreto en el valor de una variable de estado continua.
- Un evento discreto puede causar que la relación que gobierna una variable de estado continua cambie.
- Una variable de estado continua alcanza un umbral que produce que un evento discreto ocurra o sea cronogramado (evento de estado).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

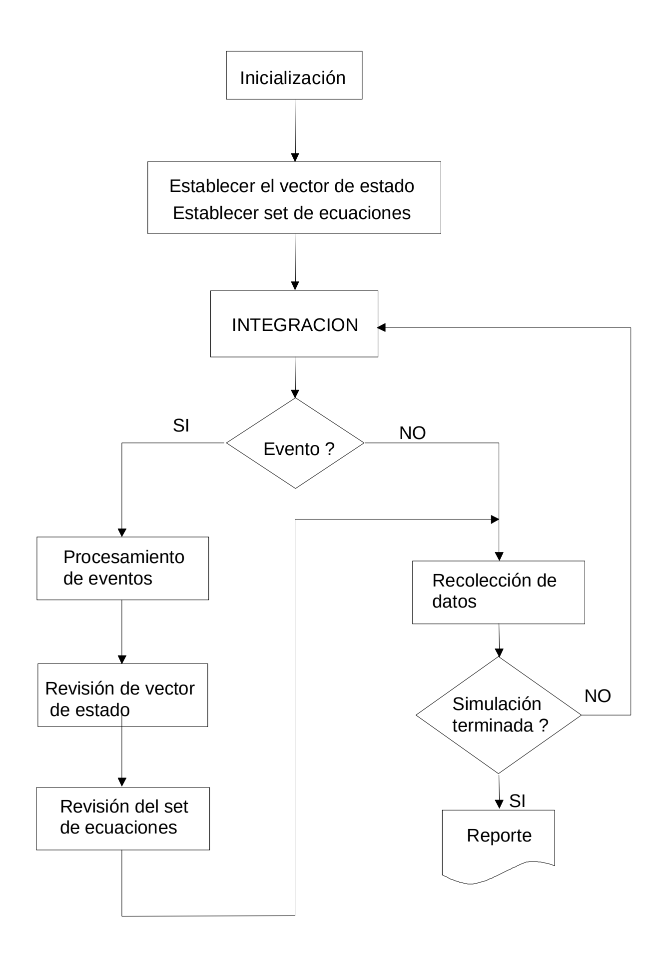


Figura XIX.10: Simulación continua-discreta combinada

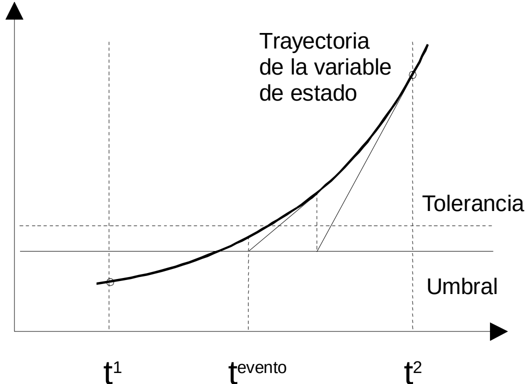
El primer tipo de interacción introduce la necesidad de que el método de integración usado para calcular la trayectoria de una variable continua soporte las discontinuidades que introducen los eventos.

Las interacciones del segundo tipo obligan a que las librerías que contienen el conjunto de ecuaciones que describen cada proceso sean dinámicas y durante la ejecución de la simulación puedan cambiar y/o modificar dichas ecuaciones. Esto implica que luego de producido un evento de esta naturaleza, el conjunto de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

ecuaciones diferenciales y algebraicas que está siendo integrado sea modificado, y el método de integración re-inicializado apropiadamente para continuar la simulación.

Las interacciones del tercer tipo introducen un tipo de evento particular conocido como "evento de estado". A diferencia de los "eventos de tiempo" cuyo momento de ocurrencia es conocido a priori y surge del cronograma establecido, el momento en que se produce un evento de estado no es conocido hasta que la variables de estado alcanza el umbral exigido (por ejemplo: el evento "fin de la reacción" se produce cuando la conversión alcanza el valor especificado). Debido a que el valor actual de la variable de estado surge de la integración de su derivada temporal, la detección del momento en que alcanza el umbral exigido suele requerir técnicas adicionales de retro-interpolación. Esta situación se esquematiza en la siguiente figura:



En el instante t1, la variable de estado aun no ha llegado al valor umbral requerido. El integrador avanza un nuevo paso, por ejemplo hasta el instante t2. Allí se detecta que el valor de la variable de estado ha sobrepasado el valor requerido. En esta circunstancia, el tiempo en el que la variable alcanza el umbral (t_{evento}) deberá encontrarse interpolando la trayectoria de la variable entre los tiempos t1 y t2.

El enfoque de simulaciones Continua/Discreta Combinada es el que la literatura concerniente a la simulación de procesos batch ha usado con mayor frecuencia. Entre los trabajos más significativos que abordan el problema de la simulación de procesos batch con técnicas de continuas-discretas combinadas, pueden citarse:

DISCON	Fruit, Reklaitis y Woods (1974)
BOSS/BATCHES	Joglekar y Reklaitis (1984)
UNIBATCH	Czulek (1988)
gPROMS	Barton y Pantelides (1994)

En estos trabajos se presentan prototipos de simuladores para procesos discontinuos y se discuten los detalles de implementación de la simulación combinada.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Mientras que el enfoque de simulaciones discreta-continua combinadas es el más adecuado para representar procesos discontinuos en general, el problema se complica enormemente cuando se desea representar rigurosamente operaciones unitarias de con modelos mecanicistas. Normalmente este tipo de descripciones requieren un considerable esfuerzo de modelación, programación, puesta a punto de los métodos, etc. Esta situación se exacerba por la necesidad de re-establecer el modelo durante la simulación.

Por esta razón se justifica un análisis que permita simplificar la implementación de un modelo de simulación aprovechando características particulares de algunos procesos batch y del tipo de problema para el cual la simulación va a ser usada.

XIX.10 SIMULACIONES DINÁMICAS DESACOPLADAS

En el caso de plantas batch monoproducto y multiproducto, donde la estructura del proceso esta fija, (la secuencia de etapas de procesamiento se realiza cíclicamente en las unidades previamente asignadas) es posible simplificar el problema de la simulación mediante una estrategia que recurre a simulaciones dinámicas de cada una de las etapas en forma desacoplada (SDD).

Para estos casos el modelo analítico de tiempos y factores de requerimiento constituye una representación exacta del proceso toda vez que dichos factores de requerimiento y los tiempos de procesamiento adopten valores actualizados. Una discusión mas detallada de los fundamentos de esta estrategia se presenta en Salomone e Iribarren, 1992, donde se demuestra que para varias de las operaciones habituales de los procesos químicos, toda la información fisicoquímica y operacional de cada etapa queda encapsulada en dichos factores. Dicho de otra forma, toda vez que se da un valor determinado a los parámetros fisicoquímicos y a las variables operativas, es posible reconstruir un modelo analítico tal como el presentado anteriormente.

Desde este punto de vista, se pueden definir módulos individuales para cada etapa que realicen simulaciones "caso base" que no dependen de la escala del proceso y no necesitan estar coordinados entre ellos más allá de los propiedades intensivas del material que pasa de una etapa a la otra.

La información relevante de entrada está constituida por: condiciones iniciales, especificaciones de producto y parámetros intensivos. El criterio de terminación para la simulación es la satisfacción de las especificaciones de la etapa y por lo tanto el tiempo de procesamiento es un resultado.

La información relevante de salida está constituida por los factores de requerimiento y los tiempos de procesamiento. Eventualmente, si fuese necesario se puede agregar como salidas del módulo factores intensivos de consumo de recursos, por ejemplo, consumo de vapor por kg de producto.

Una discusión más amplia del enfoque SDD y su aplicación al problema de optimización del diseño de un proceso batch se presenta en Salomone et al., 1994 y una aplicación de dicha metodología al análisis de performance de un proceso batch

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

fermentativo se presenta en Salomone et al., 1996.

De esta manera, la simulación rigurosa de las operaciones (normalmente una tarea de gran demanda computacional) es usada en un rol de actualización de parámetros de un modelo analítico más simple. Este enfoque tiene similitud con el enfoque "two tier" (o de niveles jerárquicos) utilizado en simulación de procesos continuos. En dicho enfoque, las simulaciones proveen las constantes de una aproximación cuadrática del modelo, actualizándolas cada vez que resulte necesario. Sin embargo, el modelo analítico usado por el enfoque SDD no es una aproximación arbitraria sino que responde a una descripción física exacta del proceso.

Esta descomposición del modelo en dos niveles de distinta complejidad aporta varias ventajas:

- El modelo analítico contiene toda la información referente a la "escala" del proceso y a los aspectos de coordinación de las etapas acorde a las políticas de operación.
- Al mantener el modelo tradicional formalmente intacto (las simulaciones sólo actualizan sus factores) es esperable que los métodos y técnicas actuales que trabajan con dicho modelo puedan ser extendidas para involucrar descripciones más rigurosas de las operaciones.
- Debido a que las simulaciones pueden hacerse para un "caso base", el esquema resulta muy práctico para problemas de diseño, ampliación de capacidad, remodelación del proceso, etc., porque el modelo analítico "es" un modelo de escalado.
- Toda la información referente a las políticas de operación y transferencias de bachadas interviene sólo en el modelo analítico a modo de restricciones adicionales. Esto hace que no sea necesario reescribir el modelo de simulación cuando se estudian cambios en dichas políticas.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Considere un proceso compuesto por 4 etapas de procesamiento batch, cuyos tiempos de procesamiento son : p_j : {5,2,7,3}. Considere además que los tiempos de carga y descarga son los mismos para todas las etapas $\theta_c=\theta_d=0.2$. Calcule el tiempo total de proceso y el tiempo de ciclado considerando un modo de operación sin solapamiento de bachadas.

P2) Idem problema anterior considerando modo de operación con solapamiemto de bachadas.

P3) Para el proceso descripto en el problema anterior, identifique la etapa con el tiempo de ciclado mínimo limitante. Calcule el tiempo de ciclado del proceso si se asignan en dicha etapa, 2 unidades trabajando en paralelo y fuera de fase.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Barton P.I. , C.C. Pantelides, “Modeling of Combined Discrete/Continuous Processes” AIChE Journal, Vol. 40, No. 6, pp 966-978, 1994.
- Belter, P.A., E.L Cussler, W.S. Hu, “Bioseparations: Downstream Processing for Biotechnology, Wiley Interscience Publication, 1988.
- Czulek A.J. "An Experimental Simulator for Batch Chemical Processes", Comput.Chem.Engng., Vol 12., No.2/3, pp 253-259, 1988.
- Fruit, W., G.V. Reklaitis and J.M.Woods "Simulation of Multiproduct Batch Chemical Processes", The Chem. Eng. J., 8, pp 199-211, 1974.
- Joglekar G.S and G.V. Reklaitis "A Simulator for Batch and Semi-Continuous Processes", Comput. Chem. Engng., Vol 8, No. 6, pp 315-327, 1984.
- Parakrama R., “Improving batch chemical processes.” The Chemical Engineer, pp 24-25, September 1985.
- Salomone H.E., O.A.Iribarren “Posynomial modeling of batch plants. A procedure to include process decision variables”, Comp. & Chem. Eng., Vol 16, Nro 3, pp 173-184, 1992.
- Salomone, H.E., J.M. Montagna and O.A. Iribarren "Dynamic Simulations in the Design of Batch Processes", Comput. Chem. Engng., Vol.18, 191-204, 1994.
- Salomone, H.E., J.M. Montagna and O.A. Iribarren "Performance Analysis of Fermentation Batch Processes by Decoupled Dinamic Simulations", Process Biochemistry., Vol.30, No.1, 47-61, 1996.
- San K. and G. Stephanopoulos "Optimization of a fed batch Penicillin Fermentation: A Case of Singular Optimal Control with State Constraints", Biotech. & Bioengng., Vol 34, pp 72-78, (1989).
- Rippin, D.W.T. "Batch Process System Engineering: A Retrospective and Prospective Review", Comput. Chem. Engng., Vol 17, S1-S536, 1993.

BIBLIOGRAFÍA RECOMENDADA

- Barrera M.D. and L.B. Evans "Optimal Design and Operation of Batch

Processes" Chem. Engng. Commun., Vol 82, 45, 1989.

- Barton P.I. , R. J. Allgor, M. D. Barrera, and L. B. Evans, "Optimal Batch Process Development", Computers and Chemical Engineering, 20(6/7):885-896, (1996)
- Reklaitis, G.V. "Progress and Issues in Computer Aided Batch Process Design", Proc. FOCAPD '89 (Siirola et al., Eds.) CAChE-Elsevier, 1990.
- Rippin D.W.T "Simulation of Single- and Multiproduct Batch Chemical Plants for Optimal Design and Operation", Comput. Chem. Engng., Vol 7, No. 3, pp 137-156, 1983

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XX

MEDICIÓN Y ESTIMACIÓN EN PROCESOS CONTROLADOS

Por
Jorge R. Vega y Nicolás J. Scenna

XX.1. INTRODUCCIÓN

Como ya vimos en el Capítulo XVI, toda política de control a lazo cerrado requiere efectuar mediciones de algunas variables del proceso, preferentemente de aquellas que se desean controlar. Idealmente, sería ventajoso disponer "en línea" de una medición de cada una de las variables de salida a controlar, y de cada una de las variables intervinientes en la ley de control. En general, las estrategias de control serán más efectivas y robustas cuanto mayor sea el número de mediciones disponibles, y cuanto más exactas sean las mismas. Sin embargo, debe también tenerse en cuenta que al aumentar el número de mediciones y/o la calidad de los sensores intervinientes, se incrementará notoriamente el costo de implementación.

En el Capítulo XVI se vio que los sistemas de control avanzado requieren conocer "en línea" algunas variables de estado y de salida, y en el caso del control en avance también se necesita medir las perturbaciones del proceso. Tales variables pueden obtenerse básicamente por dos vías: 1) la *medición directa*; y 2) la *estimación*. En el primer caso, es necesario disponer de sensores adecuados de las variables de interés. Cuando esto no es posible, se puede recurrir a medir otras variables alternativas, y a estimar las de interés por medio de algoritmos basados en el modelo matemático del proceso. En cualquiera de los dos casos, el proceso de medición propiamente dicho incorporará en la variable medida una componente aleatoria espúrea usualmente denominada "ruido de medición", que contamina y oculta el valor verdadero de la variable a medir. Los ruidos de medición pueden -en algunos casos- causar serios trastornos en la "performance" del sistema de control. Un caso típico ocurre cuando la ley de control incluye un efecto derivativo: si la variable medida o estimada es "ruidosa", el controlador derivará también tal ruido y se originarán seguramente oscilaciones y/o saturaciones indeseadas de las variables manipuladas. Para evitar este tipo de inconvenientes, en posible incorporar etapas posteriores de "filtrado" de la medición, para atenuar los ruidos originados por los sensores. (En realidad, el concepto de filtrado es mucho más amplio, y será comentado con mayor profundidad posteriormente).

En este capítulo revisaremos los conceptos básicos y las principales características asociadas a la medición y a la estimación de variables de proceso, así

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

como también algunos aspectos relevantes referidos a su implementación en esquemas de simulación numérica.

XX.2. MEDICIÓN DE VARIABLES DE PROCESO

En la Figura 1 se muestra un esquema típico (en bloques) de las mediciones en un proceso controlado por computadora, diferenciándose tres zonas principales: 1) la zona de la planta y de los instrumentos de campo (donde se ubican -entre otros- los instrumentos para sensar las variables a medir); 2) las líneas de transmisión de las variables medidas; y 3) la sala de control (con los dispositivos indicadores de las mediciones y la computadora de proceso). La Figura 1 pretende ser ejemplificativa, por lo que no necesariamente todo proceso deberá responder a ese esquema. En dicha figura, las variables del proceso se han dividido en: i) variables a realimentar (y_1); ii) variables a monitorear (y_2); y iii) variables cuyos valores no se necesitan, no se tiene interés en medir o no se pueden medir (y_3).

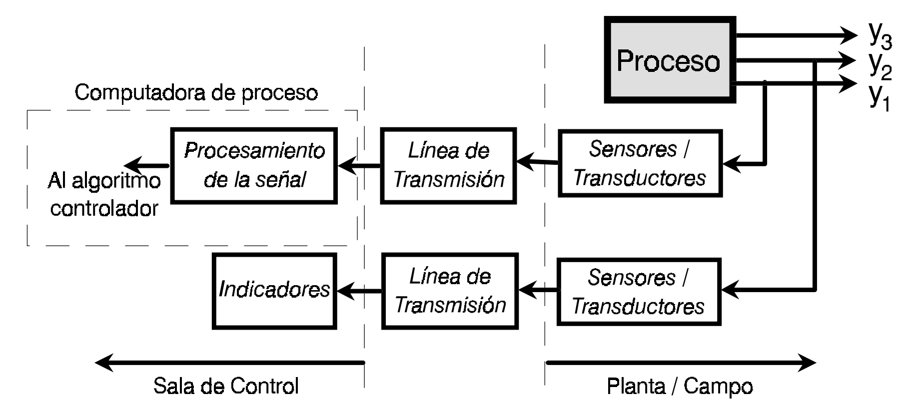


Figura XX.1: Esquema global de mediciones en un proceso controlado por computadora.

En la Tabla 1, se resumen las principales etapas involucradas en la especificación de las mediciones intervinientes en un sistema de control. En primer lugar, al diseñar un sistema de control deben seleccionarse las *variables a medir*. Los criterios de selección dependen de una serie de factores tales como la experiencia del diseñador, las exigencias de los algoritmos de control a utilizar, la seguridad pretendida en la operación del proceso, las limitaciones económico-financieras relativas a la inversión a efectuar, etc. En todo proceso, pueden clasificarse las variables según su prioridad con respecto a la medición, en: a) variables de medición imprescindible (tal es el caso de las variables a realimentar en los lazos de control); b) variables a monitorear (para observar su evolución a lo largo del proceso, pero cuyo valor no intervenga en las políticas de control a lazo cerrado); y c) variables "sin interés" de medición (cuyos valores no se necesitan conocer).

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

TABLA XX.1: Etapas típicas en la especificación de mediciones

Etapa	Principales características
1. Selección de las variables a medir	Conocimiento del tipo de control y de la “ley de control” a utilizar. Clasificación de las variables según su prioridad con respecto a la medición. Duplicación de algunas mediciones.
2. Especificación de las características de la medición	Mediciones “en línea” o “fuera de línea”; continuas o discretas. Exactitud / precisión de la medición. Retardos máximos admisibles. Multiplexado de las mediciones. Relación señal/ruido.
3. Elección de los sensores y del sistema de transmisión	Rangos operativos de las variables a medir. Elección de los sensores / transductores. Transmisión de la señal al controlador o a la computadora de proceso. Ruidos del sensor y en la línea de transmisión.
4. Procesamiento de la señal medida	Conversión analógica/digital o digital/analógica. Suavizado o filtrado de la medición.

XX.2.1. Mediciones “en línea” y “fuera de línea”

Seleccionadas las variables a medir, deben determinarse las *características de las mediciones*, que están relacionadas con las necesidades y posibilidades de efectuar esas mediciones en el proceso. Para cada variable a medir se deberá especificar si se requieren mediciones “en línea” o “fuera de línea”, continuas o discretas. Estas características quedan impuestas por las necesidades del sistema de control completo, las exigencias sobre las variables controladas, el tipo de algoritmo de control utilizado, etc. La mayor exigencia con respecto a una medición es que sea “en línea” y sin retardo; pero estas condiciones sólo se requieren muy excepcionalmente, por ejemplo cuando la variable a medir es crítica para el proceso, y cuando las constantes de tiempo características del proceso y de la variable a medir son similares y muy bajas. Además, debe tenerse en cuenta que en estos casos se requerirá de un canal de comunicación dedicado entre los sensores y la computadora, lo cual puede ser muy costoso. Por lo general, las constantes de tiempo de los procesos industriales son relativamente elevadas, y entonces los sensores utilizados pueden ser más lentos. Dependiendo de la forma en que se transmitirá y utilizará la medición efectuada, deberá también establecerse la mínima relación señal/ruido admisible y la posibilidad de multiplexado de las mediciones, como se explicará más adelante.

Sensores típicos para mediciones “en línea”

En la selección de un sensor para la medición de una variable del proceso intervienen diversos factores, tales como el tipo de variable a medir, el rango

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

operativo esperado en la variable, la exactitud y precisión de la medición, etc. En la Tabla 2, se resumen algunas de las variables de proceso más comúnmente medidas, el dispositivo utilizado como sensor, y la variable de salida del sensor. Mayores detalles con respecto a otras variables medidas, otros sensores, etc., pueden consultarse por ejemplo en Ray (1981) y Stephanopoulos (1984).

TABLA XX.2. Sensores típicos para la medición de variables de proceso

Variable	Sensor	Salida del sensor
Temperatura	Termocupla	Fuerza electro-motriz
	Termistor	Resistencia
	Oscilador de cristal de cuarzo	Frecuencia de oscilación
Presión	Manómetros	Desplazamiento mecánico
	Tubos de Bourdon	Inductancia, reluctancia
	Elementos de diafragma	Capacitancia
	Elementos piezo-resistivos	Resistencia
	Elementos piezo-eléctricos	Fuerza electro-motriz
Caudal	Tubo de Pitot	Presión diferencial
	Placa-orificio	Caída de presión
	Venturi	Caída de presión
	Turbina	Velocidad rotacional
	Ultrasonido	Efecto Doppler
Nivel líquido	Elemento flotante	Desplazamiento mecánico
	Conductividad	Resistencia
	Celda fotoeléctrica	Fuerza electro-motriz
	"Head pressure"	Presión diferencial

Para poder utilizar la variable medida (de salida) del sensor, es necesario transformarla en una señal analógica de tensión o de corriente; y para tal operatoria los sensores se acompañan de dispositivos denominados *transductores*. Por ejemplo, la medición de temperatura mediante una termoresistencia (o termistor) se basa en la variación de la resistividad de un material especial con la temperatura. El transductor deberá en este caso transformar la variación de resistencia en una variación de tensión, para lo cual se puede hacer circular por el termistor una corriente constante.

Mediciones "fuera de línea"

Los sensores comentados en el punto anterior, y muchos otros utilizados frecuentemente en la industria, permiten disponer de mediciones "en línea" de diversas variables del proceso. En algunos casos, para medir ciertas variables se requiere de procedimientos especiales que impiden la obtención de mediciones "en línea". Por ejemplo, supongamos un proceso consistente básicamente en una reacción de polimerización llevada a cabo en un reactor operado en forma batch, y donde se

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

requiere medir la distribución de pesos moleculares (DPM) del polímero producido. Es sabido que no existen sensores que permitan medir directamente la DPM, sino que deben utilizarse técnicas de caracterización específicas tales como la cromatografía líquida de exclusión con detectores de índice de refracción, viscosimétricos, etc. La determinación de la DPM por técnicas cromatográficas involucra normalmente las siguientes etapas: 1) la toma de una muestra de polímero del reactor; 2) la preparación y adecuación de la muestra a las condiciones estándares requeridas por la cromatografía; 3) la circulación de la muestra por las columnas de separación cromatográfica y por los detectores; y 4) la interpretación de los resultados provistos por los sensores (cromatogramas) para la obtención de la DPM buscada. Típicamente, los pasos 2) y 3) involucran retardos relativamente elevados (por ej., 60 minutos o más). Por tal motivo, si se pensara en utilizar esta medición para implementar estrategias de control a lazo cerrado destinadas a controlar la DPM, no se justificaría tomar muestras del reactor con una frecuencia mayor a 1 muestra/hora. Este tipo de medición caracterizada usualmente por tener que retirar muestras del proceso, llevarlas hasta un laboratorio, acondicionar la muestra, etc., define una medición "fuera de línea". En general, las mediciones fuera de línea involucran retardos de tiempo muy elevados, y sólo permiten contar con un número limitado de valores de las variables medidas durante la evolución del proceso, lo que hace dificultosa la utilización de tales mediciones para una operación en lazo cerrado.

XX.2.2. Nociones básicas sobre transmisión de las mediciones

La señal de tensión o de corriente obtenida a la salida del transductor deberá transmitirse al controlador o a la computadora de proceso. Usualmente, los transductores generan señales analógicas de pequeña magnitud (por ejemplo, tensiones del orden de algunos milivolts), de manera que su transmisión directa puede verse seriamente comprometida debido a que la señal es susceptible de ser modificada por los ruidos propios de la línea de comunicación. Para evitar este inconveniente, las señales provistas por los transductores deben ser amplificadas, normalmente hasta los rangos de transmisión estándar en comunicaciones analógicas, tales como ±10 V, 0-5 V, o 4-20 mA. Las señales analógicas de tensión se utilizan cuando las distancias son relativamente cortas (unos pocos metros); para distancias mayores es conveniente utilizar señales de corriente, que no se ven afectadas por las caídas de tensión originadas en los conductores de comunicación.

Por otra parte, en los procesos industriales suele ser común medir variables de características similares (por ejemplo, medir varias temperaturas en el proceso). En tal caso, la transmisión independiente de cada una de estas variables resultaría compleja y costosa, porque se requeriría de tantos canales de comunicación como variables se deseen transmitir. La forma usual de resolver este problema es recurrir al multiplexado de las variables medidas, normalmente en una etapa posterior a la amplificación (ver Figura 2.a). Un multiplexor es un dispositivo electrónico que

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

permite seleccionar secuencialmente una o más de sus N variables de entrada, y direccionarlas hacia los canales de comunicación de la línea de transmisión. Por ejemplo, en la Figura 2.b) se representa un multiplexor de dos canales, cuya función es seleccionar simultáneamente 2 de las N variables medidas, y derivarlas hacia los dos canales de comunicación. A intervalos de tiempo muy pequeños, se van cambiando las dos variables seleccionadas hasta completar la transmisión de las N variables medidas. Esta operación se realiza en forma periódica, normalmente con frecuencias muy elevadas del orden de los Khz o Mhz, de manera tal que si bien estrictamente la comunicación se efectúa en intervalos de tiempo discretos, los períodos involucrados son tan pequeños que las mediciones pueden ser consideradas como continuas (se supone que las constantes de tiempo del proceso son mucho mayores que los períodos de selección del multiplexor).

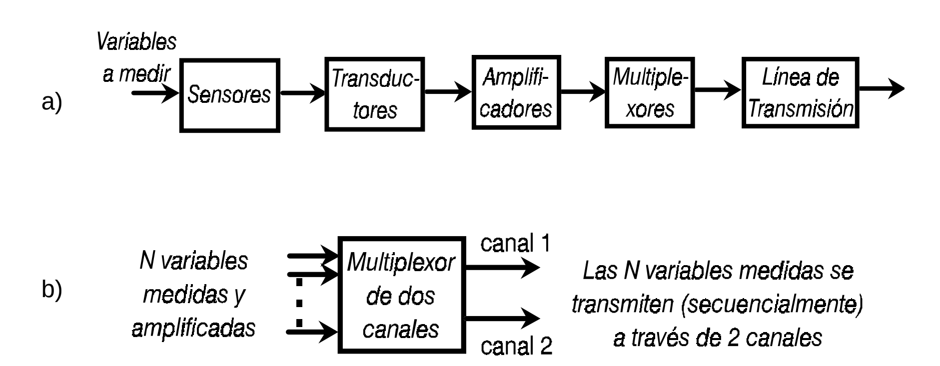


Figura XX.2: a) *Bloques típicos de medición y transmisión de señales analógicas. b) Multiplexado de N variables y transmisión por dos canales.*

En la Figura 2, se han supuesto mediciones y comunicaciones analógicas, pero los conceptos explicados son también aplicables al caso de transmisiones digitales. Una de las ventajas de las comunicaciones con señales digitales es su mayor inmunidad a los ruidos, y por tal motivo son preferidas en aquellos casos en que las líneas sean físicamente muy largas, o cuando el medio en que se ubica la línea de comunicación es muy ruidoso. El campo de las comunicaciones digitales está hoy en día muy desarrollado, y su aplicación en la industria es cada vez mayor. Una línea de comunicación digital incluye básicamente dos niveles: 1) la línea física; y 2) el protocolo de comunicación. La línea física es el medio que permite la transmisión efectiva de los datos digitales (bits), y puede ser un conjunto de cables, un coaxil, una fibra óptica, un canal satelital, una señal de radio, etc. El protocolo de comunicación se refiere a la forma en que los datos se "empaquetan" para su transmisión, y a los códigos estándares utilizados por los dispositivos ubicados en los extremos de la línea de comunicación para interpretar tales datos.

Existen un gran número de estándares de interfaces para comunicación digital, pero no profundizaremos aquí estos temas. Conceptos generales sobre comunicaciones digitales pueden consultarse por ejemplo en Amy (1992), o recurrir más específicamente a los estándares de la IEEE (particularmente el estándar 802 para redes de área local), y a los estándares sobre redes de comunicación OSI (Open Systems Interconnection) de la ISO (International Standards Organization). A manera de ejemplo, podemos mencionar la interface de comunicación serie RS-232, y sus versiones RS-232-C y RS-232-D, desarrollados por la EIA (Electronic Industries Association). Este estándar permite comunicaciones punto-a-punto, y no incluye protocolo de comunicación (por ejemplo, RS-232 se encuentra en todas las PCs como puertos serie COM1 y COM2). La línea física de una interface RS-232 incluye 25 cables, dos de los cuales son usados para la transmisión y recepción de datos, mientras que los restantes permiten controlar la comunicación. En RS-232, si las líneas de datos tienen tensiones positivas entre +3 y +35 Volts (tensión continua referida a una tierra común), representan un bit “0”; mientras que tensiones negativas entre -3 y -35 Volts representan un “1”. La interface RS-232 es recomendada para distancias de comunicación menores a los 15 metros, y con frecuencias inferiores a los 20 Kbps (1 bps = 1 bit por segundo).

Conversores A/D y D/A

En general, las salidas de los transductores son señales analógicas (por ejemplo, tensiones del orden de los milivolts), y en algunos casos estas señales pueden ser transmitidas directamente a la computadora de procesos. Cuando la medición recibida por la computadora es una señal analógica, es necesario transformarla en una señal digital; y tal operación la efectúa un dispositivo electrónico denominado conversor analógico/digital (A/D). Cuando la transmisión de la medición es digital, el conversor A/D se ubica directamente en serie con el transductor o después del bloque amplificador.

El algoritmo de control implementado en la computadora permite determinar el valor de la variable accionada, pero la señal de salida provista por la computadora es digital. Sin embargo, muchos órganos de acción final sólo responden a señales analógicas; tal es el caso del grado de apertura de una válvula para regular un caudal de alimentación. A efectos de proveer la señal analógica es entonces necesario disponer de un conversor digital/analógico (D/A). Dicho conversor se ubica inmediatamente antes del bloque correspondiente al órgano de acción final.

Para ejemplificar los conceptos anteriores, en la Figura 3 se muestra un esquema simplificado de un proceso controlado, donde se supone efectuar una única medición, la que se transmite a la computadora de proceso a través de un canal de comunicación digital. Se supone además que la señal transmitida al actuador es analógica (por ejemplo, una corriente de 4-20 mA), por lo que se incluye un bloque conversor D/A en la computadora.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

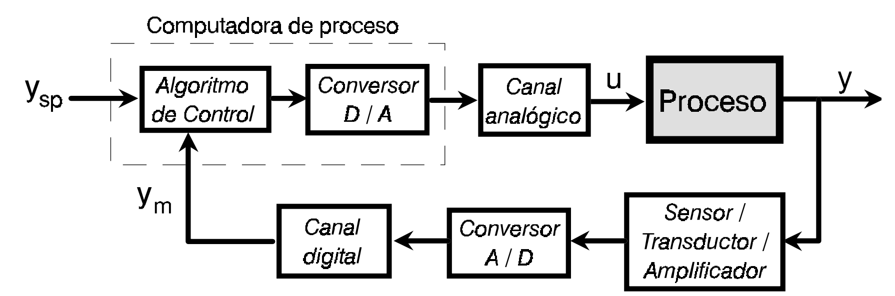


Figura XX.3: Esquema simplificado de un proceso controlado por computadora, con los bloques intervinientes en la medición, conversión A/D y D/A y transmisión.

XX.2.3. Ruidos típicos de medición

Toda señal analógica o digital que acceda a la computadora de proceso estará contaminada por ruidos incorporados en cada uno de los bloques intervinientes en el proceso de medición y transmisión de los datos. En primer lugar, podemos mencionar el ruido y/o errores introducidos por el subsistema sensor/transductor/amplificador, típicamente causado por vibraciones espúreas en los componentes mecánicos, histéresis mecánica o magnética de los sensores, no linealidades de los conversores y amplificadores, etc. La conversión A/D incorpora un ruido adicional debido a la discretización inherente a la digitalización de una señal analógica. En efecto, aun cuando la señal analógica sea libre de ruido, su digitalización produce una pérdida de resolución, que origina una fuente de ruido tanto más importante cuanto menor sea el número de bits utilizados para codificar la señal. La señal también puede verse contaminada por ruido en la línea de transmisión, por ejemplo debido a interferencias electromagnéticas que puedan alterar la magnitud de la señal analógica transmitida, o cambiar algún bit del código si la comunicación es digital.

Un concepto importante asociado a una señal es su relación señal/ruido (S/R), que se define como el cociente entre los espectros de potencia de la señal y del ruido. Recordemos que el espectro de potencia de una señal estacionaria se calcula como la transformada de Fourier de su función de autocorrelación (Papoulis, 1986). Idealmente, es de desear que la relación S/R sea infinita, para poder contar con una señal pura, que permita trabajar de una manera mucho más confiable y segura en el sistema controlado. A medida que la relación S/R de una medición empeora, menos efectiva será la política de control que utilice tal medición. En casos particulares en los que las mediciones sean críticas para el funcionamiento del sistema controlado, es necesario mejorar las características de la señal incluyendo en la misma computadora de proceso bloques de suavizado o filtrado de la señal transmitida, como parte del algoritmo controlador. Al final de este capítulo se presentarán alguno ejemplos sobre el procesamiento de señales medidas afectadas por ruidos de medición.

XX.2.4. Simulación numérica de las mediciones

Desde el punto de vista de una simulación numérica estricta de un proceso controlado, además de los bloques fundamentales de la planta y del sistema de control, también es necesario considerar los bloques correspondientes a las mediciones. La simulación numérica del sistema de medición debería -en principio- incluir los siguientes aspectos: 1) la dinámica de los sensores “en línea”; 2) el retardo de las mediciones “fuera de línea”; 3) la discretización de la señal medida; y 4) los ruidos de medición. Si bien considerar todos estos elementos puede conducir a implementaciones computacionales muy complejas, veremos que en la mayoría de los casos prácticos los bloques de simulación asociados al sistema de medición son muy sencillos y simples de implementar.

Todos los subsistemas sensor/transductor/amplificador -incluso los más simples-, tienen una respuesta dinámica característica, usualmente denominada la *dinámica del medidor*. Por ejemplo, un sensor relativamente sencillo como es una termocupla se comporta como un sistema dinámico de primer orden o de segundo orden, dependiendo de sus características constructivas (Stephanopoulos, 1984). Es decir, la respuesta dinámica de una termocupla puede representarse a través de la siguiente ecuación diferencial:

$$\tau^2 \frac{d^2T}{dt^2} + 2\xi\tau \frac{dT}{dt} + T = T_0 \qquad \textbf{(1)}$$

donde T_0 es el valor verdadero de la temperatura a medir; T es la temperatura medida; y τ, ξ (>1) son los parámetros asociados a la forma canónica de un sistema genérico de segundo orden, y dependen de las características constructivas de la termocupla. La ecn. (1) representa la dinámica de un sistema de segundo orden sobreamortiguado (ξ>1), y para tiempos suficientemente grandes $T \to T_0$. Si τ<<1, el sistema se comporta como de primer orden; y si $\tau\xi$<<1, entonces la respuesta del sensor puede considerarse instantánea (T=T_0).

La presencia de multiplexores en un sistema de medición implica la discretización de las señales, y se podrá entonces disponer de ellas sólo a intervalos de tiempo no consecutivos. Por ejemplo, supongamos que en un proceso se miden 16 temperaturas en forma simultánea con 16 termocuplas o termistores, y se deben transmitir estas mediciones a través de un único canal de comunicación. Entonces, se requerirá de un multiplexor que deberá direccionar hacia el canal de comunicación sólo una de sus 16 entradas, y lo hará con una frecuencia de conmutación de *f* [Hz]. El algoritmo de control deberá “retener” y utilizar cada medición durante un período de tiempo de 16/f [s], hasta que se efectúe la adquisición del nuevo valor transmitido (actualización de la medición). Nótese que si bien el sensado de las temperaturas a medir es continuo, la disponibilidad de las mediciones por parte del algoritmo de control hace que desde un punto de vista estricto dichas mediciones deban ser simuladas como discretas o discontinuas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Obviamente, la importancia y los cuidados en la simulación de los eventos comentados en los párrafos anteriores, dependen de la relación entre las constantes de tiempo características del proceso y las asociadas a los sensores y transmisores. En la gran mayoría de los procesos, las constantes de tiempo involucradas en cualquiera de los dispositivos asociados a la medición y transmisión de datos son muy inferiores a las de la planta propiamente dicha; y por tal motivo, a efectos de la simulación numérica las mediciones pueden ser consideradas instantáneas (sin retardo) y continuas.

Otro punto importante en la simulación de mediciones es el *ruido de medición*, cuyas fuentes y efectos han sido comentados anteriormente. En general, los modelos matemáticos más utilizados para representar el proceso de medición tienen la siguiente estructura:

$$y_m(t) = y(t) + v(t) \qquad \textbf{(2)}$$

donde $y(t)$ representa la medición libre de ruido; y $v(t)$ es un ruido modelado como aditivo.

A efectos de la simulación, los ruidos de medición se suelen modelar como un "ruido blanco". (El lector no familiarizado con los conceptos presentados en este párrafo puede remitirse a textos básicos sobre análisis de señales; por ejemplo, Brown, 1983; Papoulis, 1986). Desde un punto de vista probabilístico, un ruido blanco es un proceso aleatorio estacionario con densidad espectral de potencia constante. Estrictamente, un ruido blanco corresponde a un proceso totalmente no correlacionado, y su definición conduce a una varianza teóricamente infinita. En la práctica, todos los dispositivos poseen un ancho de banda finito (es decir, responden en un rango finito de frecuencias), y por tal motivo las simulaciones de los ruidos de medición se suelen restringir a una banda de frecuencias finita, teniéndose entonces un ruido blanco de banda limitada.

En la práctica, es usual modelar un ruido de medición a través de:

$$v(t) = \sqrt{R}\ rnd(t) \qquad \textbf{(3)}$$

donde rnd(t) representa un número aleatorio de media nula y con una distribución dada (normalmente gaussiana); y R es la varianza del ruido resultante $v(t)$. La magnitud de los números aleatorios simulados depende directamente de la magnitud de los ruidos reales conocidos para el sistema de medición completo.

XX.3. ESTIMACIÓN DE VARIABLES DE PROCESO NO MEDIBLES

Como ya se explicó en el capítulo XVI, el conocimiento de la evolución temporal de algunas variables -particularmente los estados-, es fundamental para la implementación de estrategias de control avanzado en lazo cerrado. Idealmente, las

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

mediciones involucradas en el sistema controlado deberían ser "en línea" y con retardos muy pequeños. Algunas veces, este tipo de mediciones es imposible de conseguir en la práctica, por ejemplo por razones de carácter técnico como la no disponibilidad de sensores adecuados.

En ciertos esquemas de control avanzado se requiere la medición "en línea" de algunos estados y/o de las perturbaciones del proceso (ver Figuras 7 a 11 del Capítulo XVI). Sin embargo, en la mayoría de los procesos industriales es imposible medir en forma completa el vector de estados, o contar con sensores para la medición de todas las perturbaciones. En general, el número de sensores es muy inferior al número de variables involucradas como estados y perturbaciones; y algunas variables no directamente medidas deberán ser estimadas a partir de las mediciones disponibles, de los valores de las variables manipuladas, y del modelo matemático del proceso. Si bien en el resto del capítulo nos referiremos frecuentemente a *estimación de estados*, deberá entenderse que el vector de estados puede incluir también las variables de perturbación; con lo cual, el problema de estimación de variables se reduce a un problema de estimación de estados.

En la Figura 4, se muestra un esquema en bloques de un estimador de estados genérico. Dicho estimador consiste básicamente en un algoritmo numérico desarrollado a partir del modelo matemático del proceso, que recibe información de los vectores de las condiciones inciales, variables manipuladas, mediciones, y de las estadísticas de los ruidos involucrados en el proceso y en la medición. El algoritmo estimador utiliza la información anterior para calcular los estados del proceso. La variable 't' representa al tiempo asociado a la estimación "actual", mientras que 't_m' es el tiempo en que se efectuó la última medición disponible.

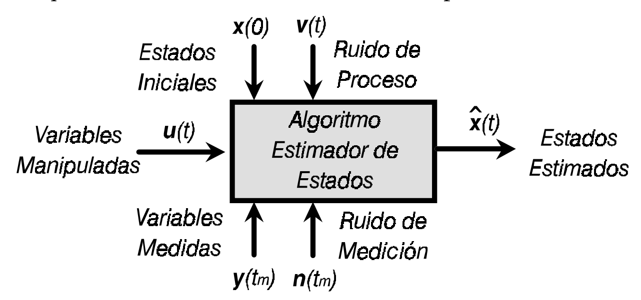


Figura XX.4: *Esquema en bloques de un estimador de estados.*

En general, los algoritmos de estimación de estados suelen ser clasificados en tres categorías: 1) suavizado; 2) filtrado; y 3) predicción. En la Figura 5, se resumen en forma gráfica los conceptos asociados a cada caso (ejemplificados para un único estado). En dicha figura, los puntos indican las mediciones disponibles (discretas y ruidosas); y en línea continua se muestra la evolución temporal del estado

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

estimado.

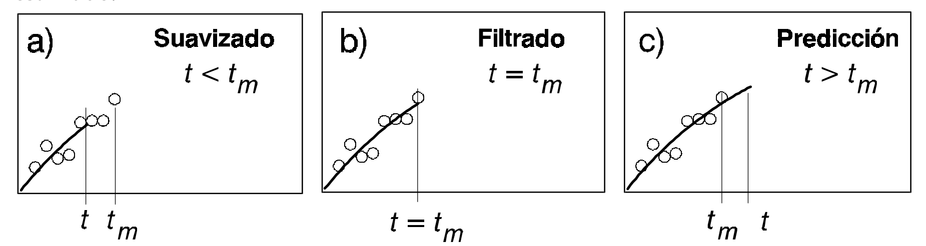


Figura XX.5: Tres tipos de algoritmos para la estimación de estados.

En la Figura 5.a), se muestra la estimación de los estados por *suavizado* de los datos. En este caso, se dispone del estado estimado con un retardo t_m-t respecto de la última medición. En la Figura 5.b), se indica las características asociadas al *filtrado* de datos, en donde la estimación de los estados se efectúa en concordancia con la última medición disponible. Por último, la Figura 5.c) representa un estimador utilizado para la *predicción* de los estados, es decir para determinar sus valores con una anticipación de t-t_m respecto de la última medición.

Los filtros son los estimadores de estados más utilizados en sistemas de control a lazo cerrado, principalmente cuando se dispone de mediciones rápidas con respecto a las constantes de tiempo típicas del proceso. Cuando las mediciones adolecen de un retardo considerable (tal es el caso, por ejemplo, de la medición de concentraciones por técnicas cromatográficas), suelen utilizarse los predictores, para que el algoritmo de control pueda utilizar información "actualizada". El suavizado, rara vez es aplicado en sistemas de control a lazo cerrado, sino que se lo utiliza más para efectuar estimaciones de variables "fuera de línea".

La estimación de estados es adecuada (robusta) cuando, a partir de la información recibida, el algoritmo estimador provee un *único* vector de estados estimados. Esta condición implica que desde un punto de vista teórico se requiera la observabilidad completa del sistema (es decir la observabilidad de todos los estados a estimar, a partir de las mediciones disponibles).

XX.3.1. Observadores

Un *observador* es un estimador de estados para un sistema que se asume como determinístico, es decir cuando pueden considerarse muy reducidos los efectos de los ruidos del proceso y/o de la medición. Para sistemas lineales, los observadores han sido ampliamente desarrollados en la literatura (ver por ejemplo, Luenberger, 1971).

No entraremos en mayores detalles sobre el desarrollo formal de observadores, pero sí consideraremos un ejemplo para interpretar los conceptos más importantes. En la Figura 6, se muestra un sistema de dos tanques interconectados.

Se pretende controlar el nivel del tanque 1, pero sólo se dispone de la medición del nivel del tanque 2. Obviamente, el “set point” de este sistema es el valor deseado h_1^d, y como no se dispone del valor de h_1 medido, es necesario entonces estimarlo mediante un observador.

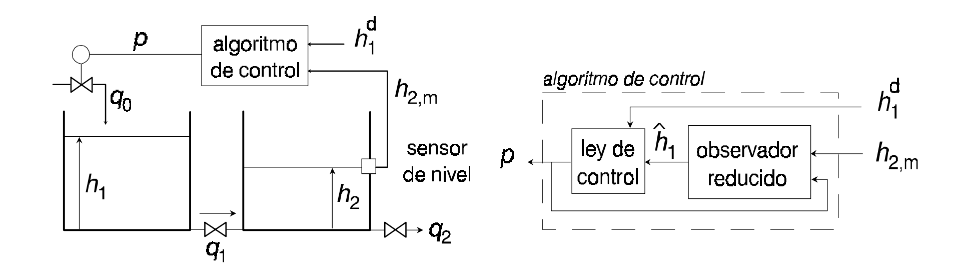


Figura XX.6: Sistema de control de nivel utilizando un observador de estados: esquema del proceso y detalle del algoritmo de control.

Consideremos el modelo matemático del proceso.

Módulo de simulación de la planta. En forma similar al ejemplo resuelto en el Capítulo XIV, pueden plantearse las siguientes ecuaciones de balance de materia:

$$A_1 \, dh_1/dt = p\, Q_0 - C_{v1}\, f\, \text{sgn}(h_1 - h_2)\, (|h_1 - h_2|)^{1/2} \; ; \;\; h_1(0) = h_1^0 \qquad (4.a)$$

$$A_2 \, dh_2/dt = C_{v1}\, f\, \text{sgn}(h_1 - h_2)\, (|h_1 - h_2|)^{1/2} - C_{v2}\, f\, h_2^{1/2} \; ; \;\; h_2(0) = h_2^0 \qquad (4.b)$$

$$0 \leq p \leq 1 \text{ (restricción de la válvula de control)} \qquad (4.c)$$

donde Q_0 es el caudal máximo que entraría al tanque 1 si la válvula de control estuviera completamente abierta (p=1).

Módulo de salida/medición. Asumiendo que la medición es exacta, se tiene:

$$y = h_2 = h_{2,m} \qquad (4.d)$$

Módulo del controlador (o ley de control). Si se utiliza un controlador con efecto P+I, resulta:

$$p = K_p\, (h_2^d - h_{2,m}) + K_p / T_I \int (h_2^d - h_{2,m})\, dt \qquad (4.e)$$

Módulo del observador. La ecuación del observador debe permitir estimar h_1 a partir de la variable accionada p y de la medición $h_{2,m}$. Tal estimación se logra con la ecn.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

(4.a), es decir:

$$A_1 \, d\hat{h}/dt = p\,Q_0 - C_{v1}\,f\,\mathrm{sgn}(\hat{h} - h_{2,m})\,(|\hat{h} - h_{2,m}|)^{1/2} \;;\;\; \hat{h}_1(0) = \hat{h}_1^{\,0} \qquad (4.f)$$

Nótese que la ecuación del observador es dinámica, y requiere por lo tanto resolver una EDO adicional.

Tabla XX.3: Parámetros del sistema de la Figura 6

A_1=5 m^2	$C_{v1}\,f$=0,02 $m^{5/2}$/min.	$h_1(0)$=1,1 m	Q_0=0,1 m^3/min.	K_p=5 m^{-1}	$\hat{h}(0)=1$ m
A_2=2 m^2	$C_{v2}\,f$=0,01 $m^{5/2}$/min.	$h_2(0)$=1,3 m	h_1^d=1,5 m	T_I=500 min.	

En la Figura 7.a) se presentan los resultados de simulación para el caso de una medición libre de ruido. Puede observarse una zona de saturación en *p*, debido al relativamente elevado error inicial en h_1; y una evolución de h_1 hacia el valor deseado. El estado estimado por el observador (línea de puntos) difiere levemente del valor real, debido al error introducido en sus respectivas condiciones iniciales (ver Tabla 3). El valor estimado converge más rápidamente al valor deseado, dado que es el utilizado en la realimentación y comparación con el “set point”. Sin embargo, nótese que el valor real converge también hacia el valor deseado de 1,5 m. En la Figura 7.b), se muestran los resultados cuando se asume un error en la medición de h_2, simulado como un ruido aleatorio de distribución normal. Aunque el error de medición es relativamente elevado, nótese que la ‘performance’ del sistema controlado es aún muy aceptable. Esto es debido al gran “efecto de filtrado” de los tanques, que atenúan las oscilaciones observadas en la variable manipulada *p*.

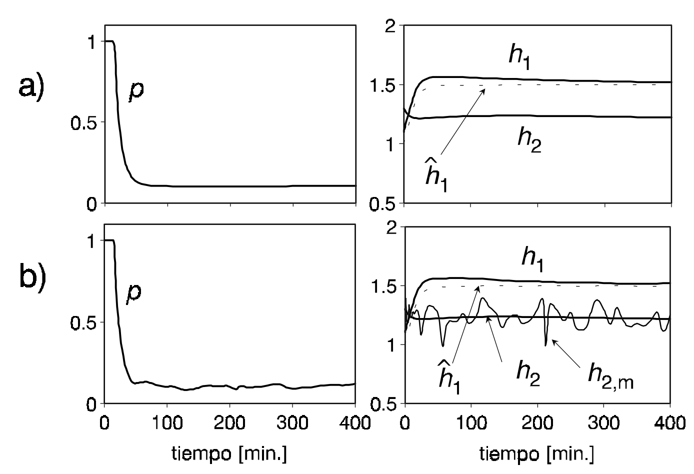


Figura XX.7: Evoluciones temporales de la variable accionada y de los niveles de agua: a) medición sin ruido; b) medición con un ruido de distribución normal.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Debe tenerse en cuenta que si bien en el problema presentado el ruido no afecta sensiblemente la calidad del control, en otros casos la 'performance' de los observadores puede ser inadecuada cuando existen ruidos en el proceso y/o en la medición. En tales casos, deberá recurrirse a filtros o estimadores de concepción estocástica.

El error entre los valores real y estimado de h_1 es también un llamado de atención con respecto a la utilización de observadores. Si el modelo del observador difiriera sensiblemente del comportamiento real de la variable, entonces podrían originarse errores apreciables en la estimación, imposibilitando alcanzar los objetivos de control deseados. Este resultado enfatiza la conveniencia de medir la variable a controlar; sin embargo, cuando tal medición no se dispone, es inevitable recurrir a su estimación.

XX.3.2. Un estimador lineal óptimo: el filtro de Kalman

Retomemos ahora el caso de la estimación de estados en presencia de ruidos de proceso y de medición. A tales efectos, consideremos un sistema lineal (o linealizado) representado por el siguiente modelo estocástico y discreto:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \boldsymbol{\varphi}_k\, \mathbf{x}_k + \mathbf{w}_k \tag{5.a}$$

$$\mathbf{z}_k = \mathbf{H}_k\, \mathbf{x}_k + \mathbf{v}_k \tag{5.b}$$

donde $\mathbf{x}_k$ es el vector de estados en el tiempo t_k; $\boldsymbol{\varphi}_k$ es la matriz de transición de estados; $\mathbf{z}_k$ es el vector de las mediciones (observaciones); $\mathbf{H}_k$ es una matriz hipotética de salida (no ruidosa) que establece la relación entre las mediciones y los estados; $\mathbf{w}_k$ es el ruido del proceso; y $\mathbf{v}_k$ es el ruido de la medición. Ambos ruidos se asumen como secuencias aleatorias "blancas", de covarianza conocida y no correlacionados entre sí, es decir:

$$E[\mathbf{w}_k\, \mathbf{w}_i^T] = \delta_{ki}\, \mathbf{Q}_k \tag{6.a}$$

$$E[\mathbf{v}_k\, \mathbf{v}_i^T] = \delta_{ki}\, \mathbf{R}_k \tag{6.b}$$

$$E[\mathbf{w}_k\, \mathbf{v}_i^T] = 0 \; ; \forall\, k, i \tag{6.c}$$

donde el supraíndice T indica "transpuesto"; $E[\ ]$ simboliza al "valor esperado"; $\mathbf{Q}$ y $\mathbf{R}$ son las matrices de covarianza de los ruidos del proceso y de la medición, respectivamente; y δ_{ki} es la delta de Kronecker usual.

El problema de estimación asociado al modelo de las ecns. (5) consiste en determinar los estados del sistema que permitan minimizar (con algún criterio de optimización), el siguiente error de estimación:

$$\mathbf{e}_k^- = \mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k^- \tag{7}$$

donde el símbolo '^' representa al valor estimado; y el supraíndice '-' indica que se trata de un valor disponible previo a la medición efectuada en el tiempo t_k. La matriz de covarianza del error de estimación es:

$$\mathbf{P}_k^- \left[\mathbf{e}_k^- \mathbf{e}_k^{-T}\right] = E\left[\left(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k^-\right)\left(\mathbf{x}_k - \hat{\mathbf{x}}_k^-\right)^T\right] \tag{8}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

El criterio de optimización consiste en minimizar el error medio cuadrático de cada uno de los términos de la diagonal principal de $\mathbf{P}_k$, que representan las varianzas del error de estimación. Este problema ha sido tratado en la literatura (Kalman, 1960), y su solución es conocida como el filtro de Kalman (FK). Posteriormente los resultados se extendieron al caso continuo (Kalman y Bucy, 1961).

En definitiva, el FK es un estimador de estados que puede ser implementado a partir del algoritmo indicado en la Tabla 4 (Brown, 1983).

Tabla XX.4. El Filtro de Kalman (discreto)

Paso	**Ecuaciones**	**Comentarios**
1	Fijar: $\hat{\mathbf{x}}_k^-$ y $\mathbf{P}_k^-$	Se fijan valores "a priori" del vector de estados y de la covarianza del error.
2	$\mathbf{K}_k = \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T (\mathbf{H}_k \mathbf{P}_k^- \mathbf{H}_k^T + \mathbf{R}_k)^{-1}$	Calcular la "*ganancia de Kalman*", $\mathbf{K}_k$.
3	$\hat{\mathbf{x}}_k = \hat{\mathbf{x}}_k^- + \mathbf{K}_k (\mathbf{z}_k - \mathbf{H}_k \hat{\mathbf{x}}_k^-)$	Actualizar la estimación con las mediciones.
4	$\mathbf{P}_k = (\mathbf{I} - \mathbf{K}_k \mathbf{H}_k) \mathbf{P}_k^-$	Calcular la matriz de covarianza del error.
5	$\hat{\mathbf{x}}_{k+1}^- = \varphi_k \hat{\mathbf{x}}_k$ $\mathbf{P}_{k+1}^- = \varphi_k \mathbf{P}_k \varphi_k^T + \mathbf{Q}_k$	Calcular los nuevos vectores de estados y de la covarianza del error.
6	Retomar el Paso 2.	Continuar con el algoritmo recursivo.

Como puede observarse, el FK es un algoritmo *recursivo* de implementación computacional relativamente sencilla, que requiere básicamente cálculo vectorial (o matricial) elemental. El algoritmo presentado en la Tabla 4 puede ser reescrito de otras maneras alternativas, y por tal motivo ecuaciones formalmente diferentes podrían encontrarse en la literatura. Además, dicho algoritmo corresponde a un modelo discreto con mediciones discretas, pero existen también versiones del FK para el caso de un modelo discreto con mediciones continuas, o de modelos continuos con mediciones discretas o continuas (ver por ejemplo, Jazwinski, 1970).

Extensión del FK para procesos con entradas determinísticas

En muchos casos, el proceso posee entradas determinísticas, y entonces el modelo de la ecn. (5.a) se transforma en:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \boldsymbol{\varphi}_k \, \mathbf{x}_k + \mathbf{B} \, \mathbf{u} + \mathbf{w}_k \qquad (9)$$

donde $\mathbf{B}\ \mathbf{u}$ es la entrada determinística adicional. La aplicación del principio de superposición para sistemas lineales, permite determinar que el FK resultante es formalmente idéntico al de la Tabla 4, con la ecuación de proyección de los estados (primera ecuación del Paso 5 del algoritmo), reemplazada por:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$\hat{\mathbf{x}}^{-}_{k+1} = \varphi\,\hat{\mathbf{x}}_k + \int_{t_k}^{t_{k+1}} \varphi(t_{k+1},\tau)\ \mathbf{B}(\tau)\ \mathbf{u}(\tau)\ d\tau \qquad (10)$$

El problema del regulador lineal estocástico

El problema que comentaremos en este punto es una aplicación del FK, y surge como una continuación natural y extensión del problema del regulador lineal determinístico ya tratado en el Capítulo XVI, pero ahora para el caso de procesos con ruidos de estadística conocida. En la bibliografía, este problema se conoce también como LQG (“linear quadratic regulator”).

Consideremos un proceso descripto por el modelo de estados estocástico y discreto de las ecns. (5,6). Como ya se mencionara en otras ocasiones, este modelo puede surgir de una linealización y una posterior discretización de las ecuaciones de balance de un proceso real. El problema de optimización consiste en determinar el vector de control **u** que permita minimizar el siguiente funcional de costo, similar al de la ecn. (13) del Capítulo XVI:

$$J = E\left\{\mathbf{x}^T(t_f)\mathbf{S}\mathbf{x}(t_f) + \int_{t_0}^{t_f}\left[\mathbf{x}^T(t)\mathbf{W}_x\mathbf{x}(t) + \mathbf{u}^T(t)\mathbf{W}_u\mathbf{u}(t)\right]dt\right\} \qquad (11)$$

Nótese que el funcional de la ecn. (11) incluye al operador E “valor esperado”, para considerar las características estocásticas del problema.

Para resolver este problema es necesario estimar los estados **x** del proceso, a partir de las mediciones **z**. Si el proceso y las mediciones fueran “libres de ruido” (o con un ruido relativamente reducido), para determinar el vector **x** sería posible utilizar un observador (como el comentado en el punto XX.3.1.); pero como el sistema considerado es estocástico (donde los ruidos pueden tornar erróneas las estimaciones de un observador), es conveniente implementar una estrategia de estimación estocástica.

Desde un punto de vista teórico, para poder resolver el problema se requiere que el sistema de las ecns. (5) sea controlable con respecto a la entrada **u**; y observable con respecto a las mediciones **z**. Si se cumplen estas condiciones, la solución del problema se divide en los dos pasos siguientes (Brown, 1983):

1) estimar los estados por medio de un FK (ver algoritmo de la Tabla 4); y

2) calcular la matriz de realimentación $\mathbf{K}_1$ como si las mediciones de los estados fueran exactas y libres de ruido (problema del regulador lineal determinístico); es decir:

$$\mathbf{u}_\mathbf{k} = -\,\mathbf{K}_1\,\hat{\mathbf{x}}_\mathbf{k} \qquad (12)$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En definitiva, la solución del problema se resume en la Figura 8.

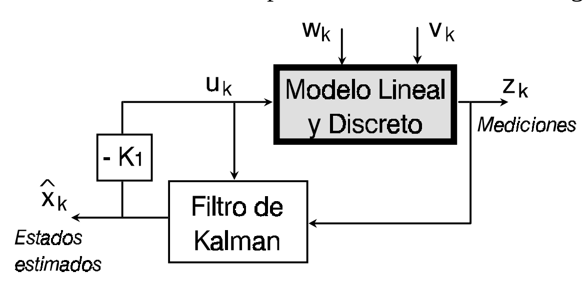


Figura XX.8: El regulador lineal estocástico óptimo.
Esquema en bloques para la simulación numérica.

XX.4. MÉTODOS DE ESTIMACIÓN PARA PROBLEMAS NUMÉRICAMENTE "MAL CONDICIONADOS"

En este punto consideraremos un problema de estimación relacionado principalmente con la implementación de mediciones "fuera de línea", y que surge con gran frecuencia en aplicaciones científicas y/o tecnológicas. Cuando se efectúan mediciones, es frecuente que la señal provista por el medidor difiera de la señal que realmente se pretende medir, ya sea porque el medidor -caracterizado por una función de transferencia *g*-, "altera" la señal original, o por la presencia de ruidos de medición (*n*). En estos casos diremos que el medidor provee sólo una medición indirecta (*z*) de la variable a medir (*u*).

En muchas aplicaciones de índole práctica, la relación entre *z*, *g* y *u* está representada por medio de la siguiente versión estocástica de una integral de Fredholm de primera especie:

$$z(t) = \int_0^{\infty} g(t,\tau)\ u(\tau)\ d\tau + n(t) \tag{13}$$

La función de transferencia, $g(t,\tau)$, se conoce también como el "ensanchamiento instrumental" del medidor. El problema de estimación (o "deconvolución") asociado a la ecn. (13) consiste en encontrar un algoritmo estimador (o "filtro"), que permita determinar $u(t)$ a partir de la medición *z*, el ensanchamiento *g*, y la estadística del ruido de medición. La Figura 9 ilustra los conceptos anteriores. El símbolo "^" indica el valor estimado de la variable.

La ecn. (13) puede considerarse como una operación de filtrado de la señal $u(t)$, a través de un filtro lineal y variante en el tiempo representado por $g(t,\tau)$. La función *g* es invariante en el tiempo cuando $g(t,\tau) = g(t-\tau)$. En tal caso, la forma de *g* no depende de τ; y la ecn. (13) se transforma en una verdadera integral de convolución. La "deconvolución" es la operación de filtrado inverso, que permite estimar la variable $u(t)$. El medidor "ideal" es aquel que no introduce ruido de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

medición, y cuya función *g* es una Delta de Dirac; en tal caso, la ecn. (13) se transforma en z=u, y entonces la medición es idéntica a la variable a medir.

A efectos de la implementación en computadora de los algoritmos estimadores, se requiere la versión discreta de la ecn. (13):

$$z(k) = \sum_{a}^{b} g(k, k_0)\ u(k_0) + n(k) \ = \ y(k) + n(k) \qquad (14)$$

donde k y k_0 son los valores discretos correspondientes a t y τ, respectivamente; [a,b] es un soporte lo suficientemente ancho como para incluir todos los valores no nulos de $z(k)$; $y(k)$ es la medición libre de ruido; y $n(k)$ es un ruido aleatorio, de media nula y varianza r. En notación vectorial, la ecn. (14) resulta:

$$\mathbf{z} = \mathbf{G}\ \mathbf{u} + \mathbf{n} = \mathbf{y} + \mathbf{n} \qquad (15)$$

donde **G** (nxp) es una matriz; y **z** (nx1), **u** (px1) y **n** (nx1) son vectores columna. La solución más inmediata del problema de inversión numérica, es por medio del método de *mínimos cuadrados* (MC) (Noble y Daniel, 1977). A partir de la ecn. (15), la estimación de *u* resulta:

$$\hat{\mathbf{u}} = (\mathbf{G}^T\mathbf{G})^{-1}\ \mathbf{G}^T\ \mathbf{z} \qquad (16)$$

La estimación de *u* a través de la ecn. (16) resolvería nuestro problema. Sin embargo, muchas aplicaciones ingenieriles se caracterizan por su mal condicionamiento numérico, evidenciado por un número de condición de $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ excesivamente grande. (El número de condición de la matriz $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$ se define como la relación entre el mayor y el menor de sus valores singulares). Cuando el problema es numéricamente mal condicionado, la estimación por mínimos cuadrados no resulta adecuada (como veremos más adelante a través de un ejemplo). La inversión numérica de problemas mal condicionados es usual en ciencia y tecnología. Tales problemas surgen, por ejemplo, cuando un sensor actúa como filtro pasa-bajos de la señal que intenta medir.

A continuación, se analizarán algunas técnicas numéricas adecuadas para la inversión de problemas mal condicionados. Clasificaremos las técnicas según sean aplicables a modelos determinísticos o estocásticos. Las técnicas basadas en modelos estocásticos son más complejas, pero resultan más adecuadas cuando se conoce la estadística del ruido de medición.

XX.4.1. Técnicas Determinísticas de Inversión Numérica

En las técnicas presentadas en este punto se consideran nulos los ruidos de medición; es decir, se asume n=0 en las ecns. (13-15).

a) *Aproximaciones Sucesivas* (AS)

La técnica consiste en sucesivas aplicaciones de la operación de convolución a la medición y funciones relativas. Se define el siguiente conjunto de funciones

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

diferencia (Ishige y col., 1971):

$$\Delta z_0(k) = z(k) \quad (17.a)$$

$$\Delta z_i(k) = \Delta z_{i-1}(k) - \sum_{-\infty}^{\infty} g(k, k_0)\Delta z_{i-1}(k_0); \ (i=1,2,...) \quad (17.b)$$

Entonces, la n-ésima aproximación de $u(k)$ se obtienen como:

$$\hat{u}_n(k) = \sum_{i=1}^{n} \Delta z_i(k) \quad (18)$$

En teoría, cuando $n \rightarrow \infty$, se obtiene la solución exacta. Sin embargo, en las aplicaciones prácticas se observa que al aumentar el número de aproximaciones, la estimación se torna cada vez más oscilatoria. Por tal motivo, es necesario detener el procedimiento para algún 'n' dado.

b) *Mínimos Cuadrados Restringidos* (MCR)

La ecn. (16) representa una solución del problema de inversión, por mínimos cuadrados no-restringidos; pero esa solución tiene inconvenientes numéricos cuando el problema es numéricamente mal condicionado. La deconvolución resulta mejor condicionada utilizando la siguiente expresión:

$$\mathbf{\hat{u}} = (\mathbf{G}^T\mathbf{G} + \beta\, \mathbf{I})^{-1}\, \mathbf{G}^T\, \mathbf{z} \quad (19)$$

donde el factor de amortiguamiento β es un parámetro ajustable de la técnica. El término $\beta\, \mathbf{I}$ reduce el mal condicionamiento del problema, al asegurar que la matriz $(\mathbf{G}^T\mathbf{G}+\beta\, \mathbf{I})$ resulte definida positiva.

c) *Descomposición en Valores Singulares* (DVS)

Es una técnica alternativa a la de MCR; y consiste en la descomponer la matriz **G** a través de (Golub y Reinsch, 1970; Hanson, 1970):

$$\mathbf{G} = \mathbf{W}\, \mathbf{Q}\, \mathbf{V}^T \quad (20)$$

donde **Q** es una matriz diagonal, cuyos elementos son los valores singulares de **G**; y **W**, **V** son matrices ortogonales cuyas columnas $\mathbf{w}_j$ y $\mathbf{v}_j$ son los autovectores de $\mathbf{G}\mathbf{G}^T$ y $\mathbf{G}^T\mathbf{G}$, respectivamente. La solución restringida óptima es:

$$\mathbf{\hat{u}} = \mathbf{V}(\mathbf{Q}^T\mathbf{Q} + \beta\mathbf{I})^{-1}\, \mathbf{Q}^T\, \mathbf{W}^T\, \mathbf{z} = \sum_{j=1}^{p} \mathbf{w}_j^T \mathbf{z} \left(\frac{\sigma_j}{\sigma_j^2 + \beta} \right) \mathbf{v}_j \quad (21)$$

donde σ_j (j=1,...,p) son los valores singulares de **G**.

d) *Transformada de Fourier* (TF)

Esta técnica es aplicable sólo cuando el ensanchamiento g es invariante en

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

el tiempo; es decir, si $g(t,\tau) = g(t-\tau)$. En tal caso, la ecn. (14) se transforma en una convolución discreta, y utilizando la transformada discreta de Fourier resulta (Papoulis, 1986):

$$Z(m) = G(m)\ U(m) \qquad (22)$$

donde Z, G y U son las trasformadas discretas de Fourier de z, g y u, respectivamente; y m es la frecuencia discreta. Una estimación (restringida) de $U(m)$ se obtiene como:

$$\hat{U}(m) = \begin{cases} \dfrac{Z(m)}{G(m)} & ;\ m \leq m_c \\ 0 & ;\ m > m_c \end{cases} \qquad (23)$$

donde m_c es una frecuencia crítica a seleccionar. La idea de la restricción introducida por la ecn. (23) es la de eliminar todas las componentes de alta frecuencia de $u(t)$, que incluyen ruidos de medición muy amplificados por el factor $1/G(m)$ (función monótonamente decreciente, y aproximadamente nula para $m>m_c$).

XX.4.2. Técnicas Estocásticas de Inversión Numérica

Las técnicas presentadas en este punto asumen la existencia de ruido de medición. Comentaremos sólo dos técnicas, basadas en el filtro de Wiener en los dominios temporal y frecuencial. Además, presentaremos exclusivamente las expresiones finales a utilizar en cada caso. Antecedentes y mayores detalles pueden consultarse en Wiener (1949) y Brown (1983).

a) *Filtro de Wiener en el Dominio Temporal* (FWt)

Se asume que: a) la entrada **u** no está correlacionada con el ruido **n**; y b) los valores esperados de **u** y **z** son nulos. Entonces, puede demostrarse que una estimación óptima de **u** es:

$$\hat{\mathbf{u}} = \Sigma_{\mathbf{u}} G^T \left(G \Sigma_{\mathbf{u}} G^T + \Sigma_{\mathbf{n}} \right)^{-1} \mathbf{z} \qquad (24)$$

donde $\mathbf{\Sigma_u}$ y $\mathbf{\Sigma_n}$ son las matrices de covarianza asociadas a **u** y **n**, respectivamente. Si estas variables se asumen como un "ruido blanco", entonces $\mathbf{\Sigma_u}$ y $\mathbf{\Sigma_n}$ resultan matrices diagonales. En una primera aproximación, pueden utilizarse las siguientes expresiones para las matrices de covarianza (Gugliotta y col., 1990):

$$\Sigma_{\mathbf{n}} = r\mathbf{I} \qquad (25.a)$$

$$\Sigma_{\mathbf{u}} = c_1 diag\left[\mathbf{z}^2(1),....,\mathbf{z}^2(n)\right]; \quad (c_1>0) \qquad (25.b)$$

donde **I** es la matriz identidad; y r y c_1 son parámetros a ajustar. Una expresión más simplificada de la ecn. (25.b) es: $\mathbf{\Sigma_u} = q\ \mathbf{I}$, siendo q un parámetro de ajuste.

Este método es muy simple de aplicar, pero tiene la limitación de involucrar

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

matrices muy grandes, y de incluir el ajuste de los parámetros r y c_1 o q (en realidad, la estimación de u resulta más afectada por la relación r/q que por los ajustes individuales de ambos valores).

b) *Filtro de Wiener en el Dominio Frecuencial* (FWf)

Consideremos el modelo estocástico invariante en el tiempo, derivado a partir de la ecn. (14):

$$z(k) = \sum_{a}^{b} g(k - k_0)\ u(k_0)\ +\ n(k) \tag{26}$$

Si se asume que: a) $u(k)$, $z(k)$ y $n(k)$ son variables estocásticas de media cero; y b) $u(k)$ y $n(k)$ no están correlacionadas, entonces la estimación óptima en el dominio frecuencial de $u(k)$ viene dada por (Wiener, 1949):

$$\hat{U}(m) = \frac{\overline{G}(m)}{G(m)\overline{G}(m) + \dfrac{\varphi_n(m)}{\varphi_u(m)}}\ Z(m) \tag{27}$$

donde $U(m)$, $G(m)$ y $Z(m)$ son las transformadas discretas de Fourier de $u(k)$, $g(k)$ y $z(k)$, respectivamente; y φ_n y φ_u son los espectros de potencia de $n(k)$ y $u(k)$, respectivamente. Si consideramos que $n(k)$ es un ruido blanco estacionario, y que $u(k)$ puede ser aproximado por $z(k)$, entonces el cociente φ_n/φ_u resulta una función creciente en m. Como $G(m)$ es una función decreciente, para frecuencias altas $G(m)\rightarrow 0$, y la inversión numérica a través de la ecn. (27) queda asegurada por el término (positivo) φ_n/φ_u. En algunas aplicaciones prácticas se encuentra conveniente reemplazar: $\varphi_n/\varphi_u = c\ m^2$ (siendo c un parámetro de ajuste). En general, valores elevados de c producen una estimación suave de u, pero distorsionada respecto al valor real; mientras que valores muy bajos de c originan oscilaciones numéricas muy pronunciadas.

XX.4.3. Ejemplos Simulados

Ejemplo 1

Consideremos las funciones $u(k)$ y $g(k)$ indicadas en la Figura 10.a), donde el "ensanchamiento instrumental" $g(k)$ lo asumimos invariante en el tiempo, es decir: $g(k)=g(k-k_0)$. La convolución numérica de ambas funciones permite obtener la medición libre de ruido, $y(k)$; y la medición real, $z(k)$, representadas en la Figura 10.b). Para el cálculo de $z(k)$, se adoptó un ruido de medición, $n(k)$, de características aleatorias, con media nula y distribución normal.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

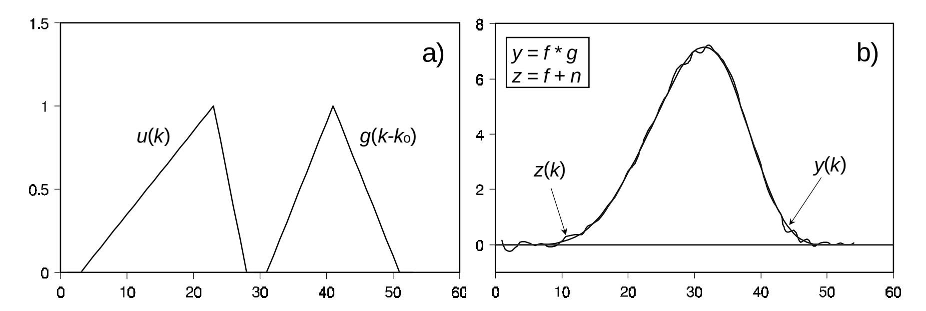


Figura XX.10: *a) señal a estimar (u) y función de ensanchamiento (g); b) mediciones libre de ruido (y) y real (z).*

La estimación más inmediata de $u(k)$ es a partir de la técnica de MC. En la Figura 11.a), se observa una estimación prácticamente exacta cuando se asume nulo el ruido de medición; sin embargo, éste no es el caso real en la práctica. La Figura 11.b) indica la ineficacia del método de MC, cuando la medición es ruidosa. Obsérvese que el ruido "esconde" totalmente la verdadera señal $u(k)$.

En la Figura 12, se muestran las estimaciones de $u(k)$ a partir de técnicas determinísticas. En la Figura 12.a), se presentan las estimaciones mediante las técnicas de MCR y DVS, observándose resultados prácticamente coincidentes. (Aunque no se muestran simulaciones, la técnica de AS provee resultados similares). En la Figura 12.b) se indica la estimación por la técnica frecuencial de TF, en la cual se adoptaron 256 puntos para la discretización de g y de z, lo que permitió aplicar un algoritmo convencional de transformada rápida de Fourier (FFT). En MCR y en DVS, a medida que se aumenta el parámetro β, se obtienen soluciones menos oscilatorias, pero más apartadas de la señal real. Efectos similares se observan en TF, al disminuir la frecuencia de corte, m_c.

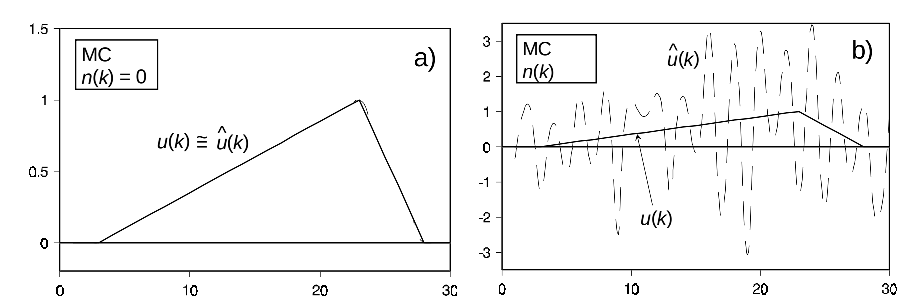


Figura XX.11: *Efecto del ruido de medición en la estimación de u(k) por mínimos cuadrados (MC). a) Medición libre de ruido; b) medición con ruido.*

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

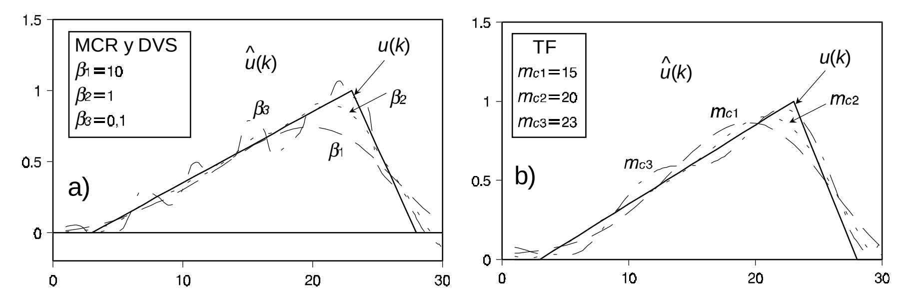


Figura XX.12: *Estimaciones con técnicas determinísticas. a) MCR y DVS; b) TF.*

En la Figura 13, se muestran las estimaciones de $u(k)$ a partir de técnicas estocásticas. En la Figura 13.a), se presentan las estimaciones mediante el filtro de Wiener en el dominio temporal (FWt); y en la Figura 13.b), los resultados correspondientes al filtro de Wiener en el dominio frecuencial (FWf). Al igual que en las técnicas determinísticas, las estimaciones menos oscilatorias se apartan más de la solución real.

Nótese que para el ejemplo aquí presentado, todas las técnicas utilizadas (determinísticas o estocásticas), proveen resultados cualitativamente similares. Sin embargo, en otros problemas donde el mal condicionamiento numérico es más elevado, la aplicación de técnicas estocásticas suele ser notoriamente ventajosa, particularmente si se conoce la estadística del ruido.

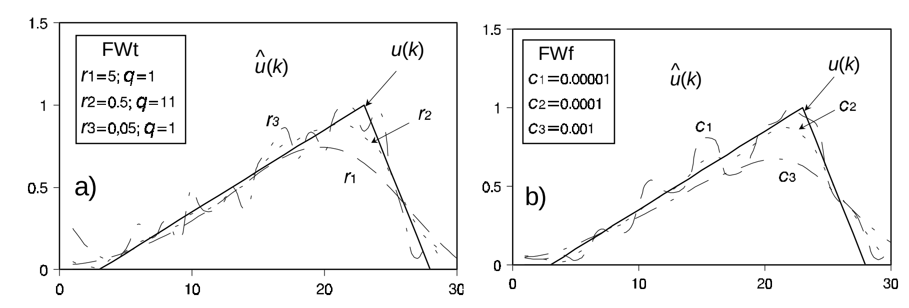


Figura XX.13: *Estimaciones con técnicas estocásticas. a) FWt; b) FWf.*

Ejemplo 2

Consideremos la medición de la distribución de tamaños de partículas (DTP) de un látex, por dispersión de luz dinámica (Kourti y col., 1990). El instrumento provee una medición $z(t)$ dada por:

$$z(t) = \int G(D,t)\; u(D)\; dD \qquad (28)$$

donde D es el diámetro de partícula; $u(D)$ es la DTP a medir; y $G(D,t)$ es el

"ensanchamiento" no uniforme característico de la medición, cuya versión discreta puede expresarse como (M$\geq$N-1):

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ e^{-a} & e^{-a/2} & e^{-a/3} & \cdots & e^{-a/N} \\ e^{-2a} & e^{-2a/2} & e^{-2a/3} & \cdots & e^{-2a/N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e^{-Ma} & e^{-Ma/2} & e^{-Ma/3} & \cdots & e^{-Ma/N} \end{bmatrix} \quad (29)$$

donde *a* es un parámetro que depende de las condiciones de medición y de la discretización usada. Para la DTP, es usual adoptar una distribución normal logarítmica, $N(D)$, dada por:

$$N(D) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma D} \exp\left[-\frac{\left(\ln D - \ln D_g\right)^2}{2\sigma^2} \right] \quad (30)$$

donde D_g es el diámetro medio geométrico de la distribución; y σ es la varianza. A efectos de la simulación, se adoptaron los siguientes valores: M=N=50; a=1; D_g = 50 nm, y σ = 0,1.

La dificultad del presente problema reside en las características del 'núcleo' de la ecn. (28), evidenciado por las columnas de la matriz *G*. En efecto, todas las columnas de *G* contienen exponenciales decrecientes, funciones sumamente suaves que dificultan la inversión numérica. En la Figura 14.a), se muestran: i) la señal a medir, $u(k)$; ii) la medición, $z(k)$; y iii) tres valores característicos del ensanchamiento, representados por tres columnas de la matriz *G*. En la Figura 14.b), se muestran las estimaciones obtenida por MCR y por FWt. El presente problema es numéricamente más dificultoso que el antes analizado; y por tal motivo, la calidad de las estimaciones es inferior.

Los ejemplos simulados indican las notorias dificultades numéricas introducidas por el ruido de medición. En general, los problemas de inversión correspondientes a ensanchamientos instrumentales "suaves" presentan una dificultad aún mayor. En los ejemplos analizados, todas las técnicas proveen resultados muy similares. Sin embargo, si se pudiera conocer la estadística del ruido de medición, las técnicas estocásticas permitirían una mejor estimación de la señal $u(k)$, ya que puede introducirse información "a priori" sobre las características del ruido, en búsqueda de la mejor solución.

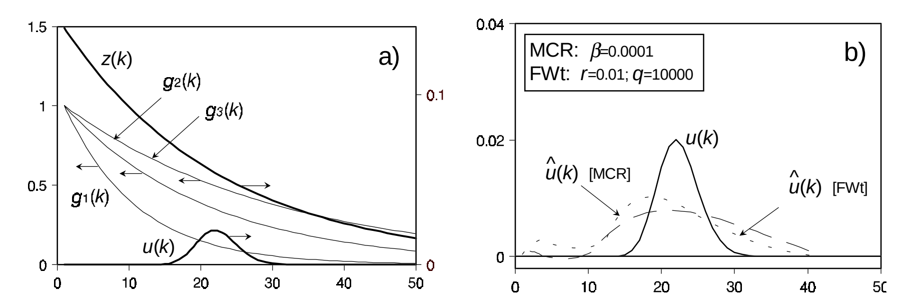


Figura XX.14: *Estimación de la DTP de un látex: a) funciones de ensanchamiento, DTP real y medición; b) estimaciones de la DTP por MCR y FWt.*

PROBLEMAS PROPUESTOS

P.1) Suponer que el sensor de nivel del ejemplo de la Figura 6 tiene una dinámica dada por: $dh_{2,m}/dt = -k\, h_{2,m} + h_2$. Simular el sistema para distintos valores de *k*, y observar las dificultades para controlar h_1 cuando *k* disminuye (es decir, cuando aumenta la constante de tiempo del medidor tornándolo más "lento").

P.2) a) Linealizar y discretizar el modelo matemático del ejemplo de la Figura 6. b) Desarrollar el Filtro de Kalman para estimar h_1 a partir de mediciones de h_2. c) Comparar los resultados con los del caso determinístico.

P.3) Considerar el problema P.3) del Capítulo XVI. Discretizar el modelo y resolver el problema del regulador óptimo estocástico en base al esquema de la Figura 8.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

BIBLIOGRAFÍA CITADA

- Amy, L. (1992). "*Automation Systems for Control and Data Acquisition*", Instrument Society of America (ISA), North Carolina.
- Anderson, B. y J. Moore (1979). "*Optimal Filtering*", Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Brown, R. (1983). "*Introduction to Random Signal Analysis and Kalman Filtering*", John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Golub, G. y C. Reinsch (1970). "*Singular Value Decomposition and Least Squares Solutions: Handbook for Automatic Computation*", II. Linear Algebra. Wilkinson y Reinsch, Ed., Springer-Verlag, New York.
- Gugliotta, L., J. Vega y G. Meira (1990). "*Instrumental Broadening Correction in Size Exclusion Chromatography. Comparison of Several Deconvolution Techniques*", J. Liq. Chromatogr., 13(9), 1671-1708.
- Hanson, R. (1970). "*A Numerical Method for Solving Fredholm Integral Equations of the First Kind using Singular Values*", Technical Memorandum No. 243, Aug. 14. Jet Propulsory Laboratory, California Institute of Technology, Pasadena.
- Ishige, T., S. Lee y A. Hamielec (1971). "*Solution of Tung's Axial Dispersion Equation by Numerical Techniques*". J. Appl. Polym. Sci., 15, 1607.
- Jazwinski, A. (1970). "*Stochastic Processes and Filtering Theory*", Academic Press, Inc., New York.
- Kalman, R. (1960). "*A New Approach to Linear Filtering and Prediction Problems*", J. of Basic Eng. Trans. ASME, Vol. 82D, 34-45.
- Kourti, T, J. MacGregor, A. Hamielec, D. Nicoli y V. Elings (1990). "*On-Line Particle Size Determination during Latex Production Using Dynamic Light Scattering*". En "*Polymer Characterization. Physical Property, Spectroscopic, and Chromatographic Methods*". Craver y Provder Ed., ACS Series.
- Luenberger, D. (1971). "*An Introduction to Observers*", IEEE Trans. Automatic Control, AC-16, 6, 596.
- Noble, B. y J. Daniel (1977). "*Applied Linear Algebra*", Second Ed. Prentice Hall, New York.
- Papoulis, A. (1986). "*Sistemas Digitales y Analógicos, Transformadas de Fourier, Estimación Espectral*", Marcombo, Boixareu Ed., Barcelona.
- Ray, H. (1981). "*Advanced Process Control*", McGraw-Hill, Inc., Chemical Engineering Series, New York.
- Stephanopoulos, G. (1984). "*Chemical Process Control: An Introduction to Theory and Practice*", Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey.
- Wiener, N. (1949). "*Extrapolation, Interpolation and Smoothing of Stationary Time Series*". J. Wiley & Sons, Inc., New York.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

CAPÍTULO XXI

SIMULACIÓN DINÁMICA EN TIEMPO REAL

Por
Enrique E. Tarifa y Nicolás J. Scenna

XXI. INTRODUCCIÓN

Como se discutió en los capítulos V y VI, los simuladores comerciales más comunes para las plantas químicas son por lo general simuladores estacionarios. Existen en la actualidad en el mercado algunos simuladores dinámicos de propósito general disponibles, esperándose un aumento en la oferta de los mismos en un futuro cercano. Se espera además, el crecimiento incipiente de los simuladores en tiempo real.

A fin de familiarizar a los estudiantes con este tipo de simuladores se describirán algunas características de los mismos en este capítulo. Se analizan en forma general los simuladores dinámicos de tiempo real y en particular se describe un simulador específico, el correspondiente a un equipo pasteurizador. Este ejemplo es utilizado para mostrar las principales características de los simuladores dinámicos de tiempo real y para demostrar la utilidad de los mismos.

Para comprender el importante rol de los simuladores dinámicos de tiempo real es necesario repasar las distintas etapas de operación que se imponen a una planta (Tarifa *et al.*, 1997): puesta en marcha, régimen normal, y parada de planta. La puesta en marcha se inicia con todos los equipos de la planta apagados, este es el estado inicial. Los operarios deben ejecutar una serie de acciones tendientes a encender todos los equipos y lograr que operen normalmente. A medida que estas acciones se realizan, el estado de la planta comienza a evolucionar. Los caudales dejan de ser nulos, las temperaturas comienzan a aumentar o a decrecer, etc. Es una situación de alta tensión ya que son muchas las variables a supervisar y todas ellas están evolucionando.

Al completar la puesta en marcha, se logra conducir la planta desde su estado inicial hasta el estado estacionario (no hay evolución de las variables) correspondiente al régimen de funcionamiento normal. En esta nueva etapa, los operadores deben supervisar continuamente el proceso a fin de verificar que se mantienen las condiciones de funcionamiento normal. Esta es una situación más relajada, pero no por ello menos crítica. En este caso, el tedio y el cansancio pueden ser tan peligrosos como el *stress*. Un operario cansado puede descuidar sus obligaciones de supervisión o carecer de los reflejos necesarios para enfrentar una situación imprevista (por ejemplo: una falla en un controlador). Las consecuencias pueden ser: accidentes, pérdidas de producción, paradas innecesarias, daños a los equipos, etc. Las mismas

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

consecuencias pueden ser ocasionadas por la falta de experiencia o de entrenamiento de los operarios.

Finalmente, las plantas deben ser detenidas periódicamente a fin de realizar tareas de mantenimiento. Nuevamente los operarios deben enfrentarse con la evolución del estado de la planta. Esta vez el estado final es la planta con todos o parte de sus equipos apagados. Los problemas que se presentan aquí son similares a los problemas descriptos para la puesta en marcha.

Los simuladores del tipo estacionario son capaces de determinar el estado estacionario de una planta dada. Esta información es de suma utilidad para la determinación de las condiciones óptimas de operación o para el análisis de distintos procesos y arreglos de equipos alternativos para producir un dado producto. Sin embargo, no lo es tanto para planear los procedimientos de puesta en marcha y parada. Tampoco es tan directa su aplicación en el estudio de situaciones tales como fallas de equipos o cambios en las condiciones de operación. Para ello es necesario que el simulador sea capaz de manejar la evolución de la planta. En efecto, ya no sólo basta con determinar el estado estacionario que alcanzará el sistema, sino que además se deben determinar todos los estados intermedios que componen la evolución. Los simuladores capaces de hacer esto son los simuladores dinámicos.

Como vimos, existen algunos simuladores dinámicos comerciales, pero son muchos menos que los estacionarios y de mayor costo. Esto hace que estén menos difundidos. No obstante, el rango de aplicaciones de este tipo de simuladores abarca las propias de los estacionarios y además pueden ser utilizados para el estudio de puesta en marcha, parada y cualquier situación que implique una evolución del estado de la planta. Como se discutió en el capítulos II y desde el XIV al presente, esta información es vital para el grupo de ingenieros que diseña los equipos y/o determina las condiciones de operación de los mismos. Ellos deben preparar a los equipos para que soporten no sólo las condiciones del régimen normal de funcionamiento, sino que además puedan superar las exigencias que implican los procedimientos de puesta en marcha y parada.

Se pueden utilizar simuladores estacionarios y dinámicos para entrenar a los operadores. De esta manera, ellos comprenderán mejor el proceso que se lleva a cabo en la planta y hasta podrán observar cuál sería la evolución del sistema cuando se alteran algunas condiciones de operación. Sin embargo, sólo pueden observar pasivamente. Para superar este problema se desarrollaron los simuladores dinámicos de tiempo real. Un simulador con estas características permite que el operador pueda interactuar con el simulador durante la simulación. Dentro de este contexto, estos simuladores son una herramienta de suma utilidad para el entrenamiento de personal, diseño de equipos, y determinación de condiciones de operación. Son evidentes las ventajas de utilizar un simulador en lugar del equipo o proceso real durante la etapa de entrenamiento: mayor seguridad, menor costo, etc.

En este capítulo se describirá un prototipo de un simulador dinámico de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

tiempo real específico (Tarifa *y col.*, 1997). El mismo presenta una interfaz gráfica que reproduce todos los elementos que se pueden encontrar en la sala de control de la planta simulada. En todo momento el usuario puede ejecutar acciones a las que el simulador responderá en forma inmediata. Por ejemplo, si el usuario cambia el *set point* de un controlador, este cambio se visualizará inmediatamente en el visor correspondiente; al tiempo que la variable controlada comenzará a evolucionar para alcanzar la nueva consigna. El tiempo real que tardará la variable en alcanzar su valor final depende de la dinámica del proceso, mientras que el tiempo de cálculo dependerá de la computadora, del modelo implementado, y su forma de resolución. Es conveniente que el simulador esté diseñado para que los dos tiempos concuerden. De esta manera, el usuario no podrá determinar si está frente a un simulador o si está operando realmente el proceso a través de la computadora. Las aplicaciones de este tipo de simuladores son todas las anteriormente mencionadas más el estudio de los efectos del *stress* y del cansancio en los operadores, el estudio de los procedimientos operativos, y el entrenamiento de operarios.

En las secciones siguientes se describirán los procedimientos necesarios para el modelado en general, las características de este tipo particular de simuladores, y algunas de las potenciales aplicaciones.

XXI.2 CARACTERÍSTICAS GENERALES DE UN SIMULADOR EN TIEMPO REAL

El simulador que se presentará en este capítulo tiene las siguientes características (Tarifa *et al.*, 1997):

- *Dinámico:* Considera la evolución temporal del proceso. No se limita a describir los estados estacionarios, sino que además determina cómo el proceso evoluciona hasta llegar a ellos.
- *Interactivo:* Permite que el usuario interactúe en todo momento con el proceso tal como lo haría con el sistema real.
- *Tiempo Real:* Un segundo de simulación corresponde a un segundo de evolución del proceso real.
- *Ruidos:* Está capacitado para simular los ruidos provocados por las perturbaciones del proceso.
- *Fallas:* Está capacitado para simular fallas en los equipos del proceso.

Para explicar estas características y la necesidad de contar con ellas, se utilizará un proceso simple. En la Figura 1 se puede observar un tanque con flujo gravitacional y un control de nivel del tipo P+I.

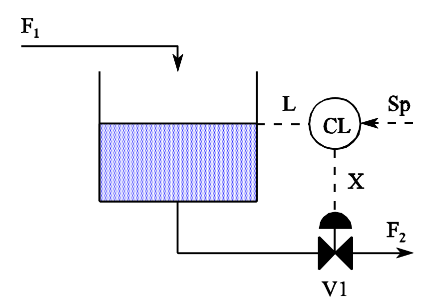


Figura XXI.1: Tanque con flujo por gravedad.

Como se discutió en el Capítulo XIV, el modelo del tanque nos indica que un aumento en el ingreso de líquido debido al caudal F_1 provoca un aumento en el nivel L. Este aumento a su vez provoca un aumento en el caudal de salida F_2. Esta descarga disminuirá el nivel L. De esta manera, el nivel L está sometido a dos efectos contrarios. Cuando el nivel adopte un valor tal que haga que los dos efectos se cancelen entre sí, entonces el tanque habrá alcanzado un estado estacionario con L constante. Este estado final dependerá de la apertura X de la válvula V1. Esta válvula es manipulada por el controlador CL. Este dispositivo regulará la válvula de manera tal que el valor de L en el estado estacionario concuerde con el *set point* Sp.

Suponga que tanto L como Sp son iguales a la mitad da la altura del tanque, es decir que el proceso está en un estado estacionario. Suponga además que el operario realiza un cambio de Sp y el nuevo valor es levemente inferior a la altura del tanque. Inmediatamente, el controlador cerrará la válvula para provocar un aumento del nivel. El nivel comenzará a aumentar para alcanzar el nuevo estado estacionario. Un simulador estacionario dirá que, en el nuevo estado estacionario, el nivel concordará con el nuevo valor de Sp, pero no cómo L alcanzará ese nuevo estado. No obstante, el operador puede hacer las siguientes preguntas: ¿La altura se acercará asintóticamente al valor final?, ¿Será posible que por la inercia del sistema la altura supere momentáneamente el valor de Sp rebalsando el tanque?, ¿Cuánto tiempo demandará alcanzar el nuevo estado estacionario?.

Para obtener las respuestas se debe utilizar un simulador dinámico. Estos simuladores pueden mostrar al operario un gráfico de nivel (L) vs. tiempo. Del análisis de ese gráfico el operario puede obtener todas las respuestas, por ejemplo: el tanque rebalsará en 10 minutos. Sin embargo, él sabe que esa situación no se presentará en el sistema real porque hay tiempo más que suficiente para que pueda observar que L está aumentando muy rápidamente y tomará alguna acción para evitar que el líquido rebalse. Entonces, surgen otras preguntas: ¿Qué acciones tomar?,

¿Cuándo y cómo tomarlas?, ¿Tendrá el suficiente entrenamiento para no desesperarse cuando se activen las alarmas?, ¿Cómo evolucionará el proceso ante las acciones tomadas y cómo reaccionará él ante esa evolución?

En la mayoría de los casos, el operario obtiene estas respuestas a través de prueba y error con todos los trastornos personales y económicos que ya se comentaron. Sin embargo, estas consecuencias se pueden minimizar utilizando un Simulador Dinámico de Tiempo Real para entrenar al operador y sacar conclusiones correctas.

Otro problema que debe enfrentar el operador es el ruido del proceso. Este ruido es inevitable y se origina en las turbulencias del mismo, vibraciones, fricciones, etc.. En el tanque, es evidente que el sensor de nivel no reportará un valor constante debido a que la caída del líquido de alimentación provoca ondulaciones en la superficie. Esto genera un ruido en los valores de L reportados al controlador. Este ruido será amplificado por el controlador, originando un mayor ruido en el valor X. El ruido en X afectará directamente a F_2, originando un ruido en esta variable. Finalmente, este ruido afectará nuevamente a L. Por último, como vimos en el Capítulo XVI, existe el ruido en la medición.

Ahora, el operador no puede determinar con precisión los valores de las variables del proceso. También se complicó la determinación de tendencias, ya que no es posible afirmar rápidamente si una variable está aumentando o disminuyendo su valor. Por lo que aparecen nuevas preguntas: ¿Podrá el ruido desestabilizar el sistema debido a la amplificación que realiza el controlador?, ¿Si la altura se acercaba asintóticamente al valor final de Sp, podrá el ruido provocar que el líquido rebalse de todas formas?, ¿Cómo ajustar las alarmas para que no se disparen por el ruido?. Para responder estas preguntas es necesario simular el ruido, y por lo tanto comprender su naturaleza.

Finalmente, el operador debe también estar preparado para intervenir cuando algún equipo falla. Por ejemplo, suponga que el sensor de nivel falla y comienza a reportar un nivel nulo. El controlador cerrará la válvula para tratar de corregir esa lectura. Esto provocará que el nivel abandone su valor normal y comience a aumentar. Si el operario no interviene, el tanque rebalsará. ¿Qué acciones se deben tomar?, ¿Cuánto tiempo demandarán?, ¿Qué efecto tendrá el *stress*?.

Como ya se discutió en los capítulos anteriores, es necesario simular las fallas para poder contestar a estas preguntas. Es posible utilizar un simulador dinámico para determinar los efectos de una falla en la planta. No obstante, para verificar la reacción del operador ante una situación de esta naturaleza, es necesario contar con un simulador en tiempo real.

En síntesis, la simulación dinámica tiene gran aplicación en los estudios realizados para optimizar el diseño o las condiciones de operación de una planta. Al permitir conocer la forma en que evolucionará el proceso ante perturbaciones dadas, permite identificar estados peligrosos o inconvenientes para el proceso que no podrían detectarse con una simulación estacionaria. Por los mismos motivos, un simulador

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

dinámico es de suma utilidad para realizar el entrenamiento de operarios o de estudiantes de ingeniería. Sin embargo, esta herramienta tendría mucho más potencial en todas las aplicaciones si se le sumara la característica de tiempo real. Esto es, el simulador debe permitir que el usuario pueda interactuar continuamente mientras se está realizando la simulación. Más aún, el tiempo de simulación deberá ser totalmente equivalente al tiempo real de operación del proceso.

Por ejemplo, los simuladores de tiempo real están siendo ampliamente utilizados en otros campos. La aeronáutica es uno de ellos. Permiten el óptimo entrenamiento de pilotos salvaguardando vidas y costoso equipamiento. De esta manera, no sólo se elimina el riesgo de pérdidas de vidas o equipos, sino que además se disminuyen drásticamente los costos de entrenamiento (no hay consumo de combustible, no se utiliza un avión real, no se renta una pista, no hay gasto de personal, etc.).

La utilidad que tendría una herramienta de este tipo para plantas químicas es amplificada por las características del sistema a tratar. En efecto, las plantas químicas tienen un elevado costo de operación, los riesgos de causar pérdidas de vidas y bienes materiales ante un accidente son inaceptables, la complejidad de las mismas ha crecido notoriamente (reciclos, sistemas altamente interconectados, complejos sistemas de control, etc.). Todos estos elementos hacen aumentar notoriamente la conveniencia de contar con una herramienta como la descripta para desarrollar tareas de diseño, mantenimiento, supervisión, control y entrenamiento.

Si bien las ventajas de la simulación dinámica sobre la estacionaria son evidentes, la mayoría de los simuladores comerciales son del tipo estacionario. Esto se debe a las dificultades que encontraron los equipos de investigación para desarrollar simuladores dinámicos tan generales como los estacionarios, lo cual se refleja en el costo. En efecto, la mayor complejidad de los modelos (se agregan ecuaciones diferenciales), el uso intensivo del módulo de físico-química, y la mayor exigencia para los métodos numéricos (mayor complejidad del modelo y de las condiciones de operación del simulador), han elevado considerablemente el costo de desarrollo de este tipo de simuladores.

Dentro de este contexto, si es costoso el desarrollo de un simulador dinámico, mucho más lo es el de un simulador dinámico de tiempo real. En efecto, a las exigencias que plantea un simulador dinámico se les agregan las propias de un simulador de tiempo real. Muchas de esas exigencias tienden a ser incompatibles entre ellas. Por ejemplo, la complejidad del modelo dinámico se contrapone con la necesidad de velocidad de cálculo que exige el funcionamiento en tiempo real. Algo parecido ocurre con la interfaz gráfica, la misma debe proveer toda la información y elementos necesarios para la supervisión y control del proceso; todo esto sin abrumar al usuario.

En este capítulo se analizará una estructura básica que permite encarar la construcción de un simulador dinámico de tiempo real. Se tomará un sistema simple

para ejemplificar dicha estructura y los pasos que deben darse para implementarla. A pesar de la simplicidad del sistema elegido, todos los conceptos explicados son directamente aplicables a sistemas de mayor complejidad.

XXI.3 CONSTRUCCIÓN DE UN SIMULADOR DE TIEMPO REAL

XXI.3.1 Tiempo real

Para describir los pasos a seguir en la construcción de un simulador de tiempo real se utilizará el sistema presentado en la Figura 1. Debido a que la velocidad del simulador es un factor crítico, se prefiere utilizar un modelo orientado a ecuaciones en lugar de un modelo modular. Esto significa, según discutimos en el Capítulo V, que se pierde la posibilidad de contar con una biblioteca general de modelos, pero se reduce la complejidad del simulador y se puede optimizar la resolución del modelo. Estos dos elementos incrementan la velocidad de simulación. Por lo tanto, el modelo del proceso a simular está compuesto por un sistema de ecuaciones algebraicas y otro de ecuaciones diferenciales. El sistema de ecuaciones algebraicas es:

$$F_2 = Cv\ X\ \sqrt{L} \qquad \textbf{(1)}$$

$$\varepsilon = L - Sp \qquad \textbf{(2)}$$

$$X = Kc \left(\varepsilon + \frac{1}{Ti}\ Xi \right) + X_0 \qquad \textbf{(3)}$$

El sistema de ecuaciones diferenciales es:

$$A\ \frac{dL}{dt} = F_1 - F_2 \qquad \textbf{(4)}$$

$$\frac{dXi}{dt} = \varepsilon \qquad \textbf{(5)}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

donde ε es el error del controlador, Xi es el efecto integral, X_0 es la apertura inicial de la válvula, Cv es la conductividad de la válvula, y A es el área de la sección transversal del tanque, L el nivel, F_1 y F_2 caudales de entrada y salida respectivamente, y ε el error.

La Figura 2 muestra la estrategia de simulación seguida (Tarifa *y col.*, 1997). El simulador inspecciona constantemente la interfaz. Cuando detecta algún evento, como por ejemplo la pulsación de un botón, inmediatamente suspende la inspección y ejecuta la rutina programada para ese caso. Esta suspensión de la actividad de inspección, mientras ejecuta una rutina, impide que el usuario pueda interactuar en ese momento. Esta característica debe ser tenida en cuenta cuando se planifica la estrategia de simulación a fin de permitir que el usuario pueda interactuar mientras el simulador está realizando los cálculos. Para ello, se programa un *timer* que ejecuta una rutina cada vez que transcurre un intervalo de tiempo Δt previamente especificado. Esto es, se programa una "interrupción". La rutina que se activa en el tiempo t +Δt realiza los cálculos necesarios para determinar el estado del proceso en dicho instante, partiendo del estado correspondiente al tiempo t. Una vez que se completaron los cálculos, el simulador vuelve a inspeccionar la interfaz en busca de acciones realizadas por el usuario.

Cuando se da inicio a la simulación, el reloj se coloca en cero (t = 0), se calcula el estado inicial del proceso, se actualiza la interfaz, y se habilita el *timer* (el reloj se pone en marcha). El simulador inspecciona la interfaz en busca de eventos causados por el usuario. Todo evento será debidamente tratado, por lo tanto el usuario puede interacturar con el simulador. Cuando se alcanza el tiempo t +Δt la rutina programada en el *timer* se ejecuta por primera vez. El simulador deja de atender la interfaz mientras esta rutina realiza los correspondientes cálculos, es un "tiempo muerto" para el usuario. Una vez finalizada la ejecución de la rutina, el control retorna al simulador. El ciclo se repite constantemente hasta alcanzar alguna de las condiciones de terminación. Cuando una de estas condiciones se alcanza, el *timer* se deshabilita (el reloj se detiene).

En la Figura 2 se muestra la relación que existe entre los eventos, rutinas, y los componentes de la interfaz. Los eventos considerados son:

- *Controles:* Son los eventos que se originan cuando el usuario utiliza los controles de la interfaz (por ejemplo, cuando cambia el *set point*).
- *Simular:* Es el evento que se origina cuando el usuario inicia la simulación.
- *Timer:* Es el evento originado por el *timer* cada Δt segundos.
- *Detener:* Es el evento que provoca el usuario, o el mismo simulador, cuando detiene la simulación.

Las Rutinas utilizadas en la Figura 2, y que son ejecutadas por los eventos, son:

- *Inicializar:* Establece los valores iniciales de las variables pertenecientes al sistema de ecuaciones diferenciales.

- *Integrar:* Realiza la integración del sistema de ecuaciones diferenciales desde t a t +Δt.
- *Resolver:* Resuelve el sistema de ecuaciones algebraicas.
- *Reportar:* Actualiza los valores reportados por los indicadores y registradores (indicadores de caudales, registrador de nivel, etc.) con los últimos valores calculados. También se encarga de detener el simulador cuando el estado alcanzado invalida alguna hipótesis adoptada en el modelo, por ejemplo cuando el tanque rebalsa o se vacía del todo.
- *Actualizar parámetros:* Actualiza los parámetros del modelo con los valores introducidos por el usuario a través de los controles que provee la interfaz (cursores para fijar el *set point*, la ganancia del controlador, etc.)
- *Timer ON:* Habilita la interrupción del *timer*. Se pone en marcha el reloj.
- *Timer OFF:* Deshabilita las interrupción del *timer*. Se detiene el reloj.

Finalmente, los componentes de la interfaz son:

- *Indicadores:* Son los elementos que muestran en forma numérica o gráfica el valor presente de alguna variable.
- *Registradores:* Son los elementos que muestran en forma numérica o gráfica los valores históricos de alguna variable.

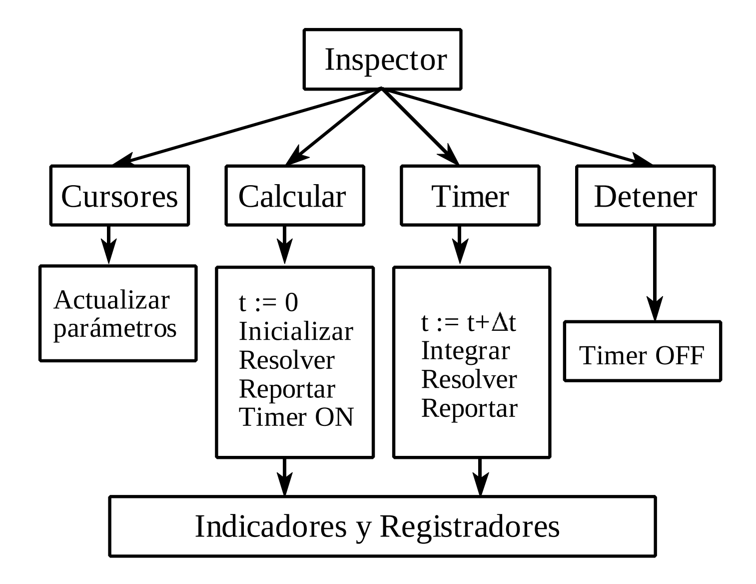


Figura XXI.2: Estrategia de Simulación.

XXI.3.2 Ruidos y fallas

Una vez establecida la estrategia básica de simulación, resta analizar la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

manera en que se simularán los ruidos y las fallas. Como hemos visto en capítulos anteriores, los ruidos que afectan a un sistema pueden clasificarse en ruidos de proceso y ruidos de medición.

Además, los ruidos de proceso los subclasificaremos según su origen en externos e internos. Llamamos ruidos de proceso externos a aquellos introducidos en el proceo desde el exterior. En el sistema del tanque que se está analizando, un ruido externo es el ruido que afecta al caudal de alimentación F_1 (variaciones del caudal). Este ruido se origina fuera del tanque, pero afecta el nivel de agua y debe ser considerado en la simulación. Por otra parte, un ejemplo de ruido de proceso interno son las ondulaciones que se originan en el nivel de líquido provocadas por el caudal de alimentación que cae desde una cierta altura. En realidad, los ruidos internos deben asociarse a modelos incompletos. En efecto, si las ondulaciones del líquido pudieran predecirse a través de un modelo detallado, tal ruido interno no existiría.

Para simular el ruido en F_1 basta con sumar a los valores del caudal de entrada un número aleatorio de distribución normal, con valor medio μ_{F1} y desviación estándar σ_{F1}. En cambio, la simulación del ruido interno exige un poco más de atención.Este ruido afecta directamente a L, pero no debe afectar a la L que figura en el término izquierdo de la ecuación 4, dado que esa ecuación surgió de plantear el balance de materia; entonces, la variable original en dicho término es el volumen V (a densidad constante) y no L. El volumen V no es afectado por las ondulaciones, por lo tanto el ruido no debe intervenir en ese término. El modelo ahora adaptado para simular el ruido es:

$$F_1 = \mu_{F1} + \text{ruido}(\sigma_{F1}) \tag{6}$$

$$L = \frac{V}{A} + \text{ruido}(\sigma_L) \tag{7}$$

$$F_2 = Cv\ X\ \sqrt{L} \tag{8}$$

$$\varepsilon = L - Sp \tag{9}$$

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

$$X = Kc \left(\varepsilon + \frac{1}{Ti} Xi \right) + X_0 \qquad \textbf{(10)}$$

$$\frac{dV}{dt} = F_1 - F_2 \qquad \textbf{(11)}$$

$$\frac{dXi}{dt} = \varepsilon \qquad \textbf{(12)}$$

donde la función ruido retorna un número aleatorio con distribución normal, valor medio nulo y desviación estándar σ.

Se debe notar que, si bien sólo F_1 y L son afectadas directamente por ruidos, las variables restantes serán también afectadas. El grado en que ello ocurrirá depende de la dinámica del sistema. Para aclarar este concepto, observe la Figura 3.

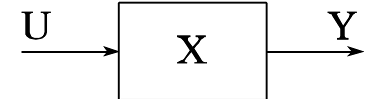


Figura XXI.3: Modelo del sistema.

donde U es el vector de variables de entrada, X es el vector de variables de estado, e Y es el vector de variables de salida; todas ellas relacionadas entre sí a través de un modelo de estados. Para simular ruidos externos se deberá afectar las correspondientes componentes del vector U. Para simular "ruidos internos" se deberá afectar las correspondientes componentes del vector X. Los ruidos propios de los sensores se simulan afectando el vector Y. En el modelo anterior se supone que los ruidos de los sensores son despreciables. Observe que las componentes no afectadas directamente por el ruido generado, serán perturbadas a través de la dinámica del sistema.

Otro punto importante a considerar es la capacidad de simular escenarios de fallas. Como ya se dijo, las fallas que afectan a un sistema pueden ser caracterizadas desde varios puntos de vista. Pueden afectar parámetros del modelo y/o la forma del

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

modelo, como así también pueden existir fallas bruscas, graduales, débiles y fuertes (Tarifa, 1995).

Por falla se entiende a la perturbación inicial que afecta al sistema, haciendo que el mismo abandone su estado normal de operación. Las consecuencias observables de una falla se denominan síntomas. Los síntomas más comunes son los valores anormales que adoptan las variables. Para simular una falla sólo se deberá modelar la perturbación inicial, ya que la misma simulación se encargará de propagar los efectos a lo largo del sistema originando los correspondientes síntomas.

Ya se discutió en el Capítulo XIV que el modelado de la perturbación inicial puede requerir la alteración del valor de algún parámetro del modelo, una variable de entrada, o la alteración del mismo modelo. Por ejemplo, si en el sistema del tanque se desea simular un taponamiento en la válvula de descarga, entonces bastará con reducir el valor del parámetro Cv. Si se quiere modelar la disminución del caudal de alimentación, basta con disminuir el valor de la variable de entrada F_1. Por el contrario, si lo que se desea modelar es una fuga en el tanque a un altura h, esto requiere que el modelo se modifique apropiadamente. En efecto, habrá que considerar la existencia de un tercer caudal F_3 que será calculado como:

$$F_3 = \begin{cases} 0 & si \ L \leq h \\ Cf \sqrt{L-h} & si \ L > h \end{cases} \tag{13}$$

donde F_3 es la fuga y Cf la conductividad del orificio por donde se produce la fuga.

También se deberá modificar la ecuación diferencial que surge del balance de materia (densidad constante):

$$\frac{dV}{dt} = F_1 - F_2 - F_3 \tag{14}$$

Si consideramos tanques en serie podrían aparecer complicaciones debido a situaciones que involucren retroflujo, que debe ser tenido en cuenta en los balances respectivos.

En cuanto a la forma de producir la perturbación inicial, el uso de funciones escalones para simular fallas bruscas puede causar problemas numéricos en la simulación debido a la discontinuidad de la derivada. Por otra parte, es de interés simular fallas lentas o graduales utilizando funciones rampas. Por estos motivos, es conveniente utilizar funciones especiales como la denominada "escalón continuo"

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

(Tarifa, 1995), dada por:

$$H(x) = \frac{1 - \cos(\pi\ x)}{2} \qquad \textbf{(15)}$$

La Figura 4 muestra el comportamiento de esta función. Como puede apreciarse, la misma es capaz de simular un escalón o una rampa dependiendo de la normalización de *x*.

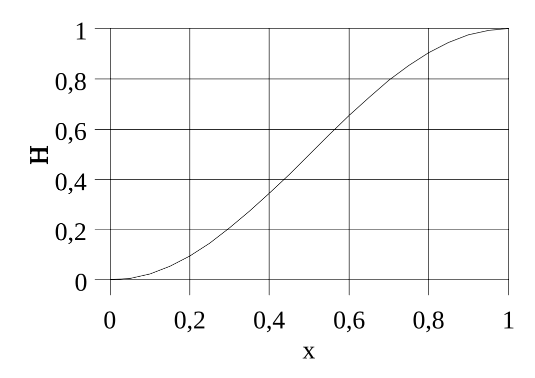


Figura XXI.4: Función escalón continuo H(*x*).

La estrategia de simulación debe adaptarse tanto a la simulación de ruidos como de fallas. La Figura 5 muestra la nueva estrategia. Para simular ruidos se agregó la rutina *Ruidos* en el *Timer*. Esta rutina genera los ruidos que simulan los correspondientes a los medidores y al proceso, repectivamente; y que serán agregados luego a las correspondientes variables. También, es importante destacar que la rutina *Ruidos* está separada de las rutinas *Integrar* y *Resolver*. De esta forma, al ser el ruido conocido y constante en estas rutinas, no se afecta la convergencia de los métodos numéricos utilizados. Esto es, no se resuelven ecuaciones diferenciales estocásticas, solo se adiciona el ruido del proceso suponíendolo conocido previamente. Por otra parte, se agregó la rutina *Fallas* en el *Timer* para simular fallas que alteran parámetros o variables de entrada, y se modificó la rutina *Resolver* para simular fallas que alteran el modelo.

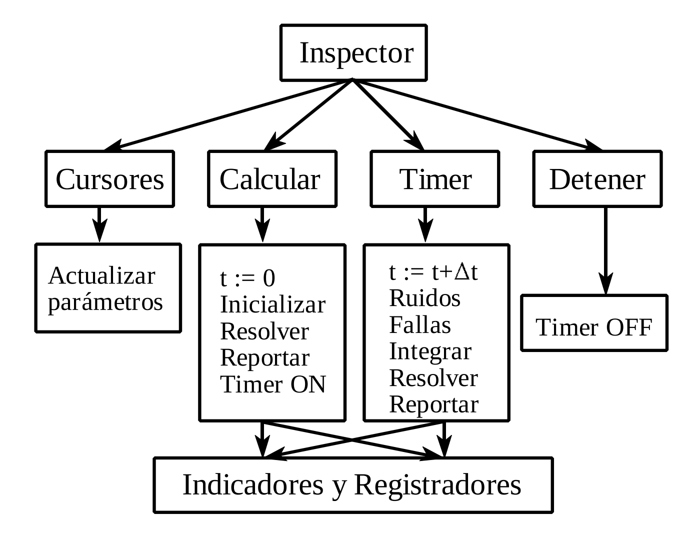


Figura XXI.5: Nueva estrategia de simulación.

XXI.4 PASTEURIZADOR HTST 1.0

XXI.4. 1. Descripción del Proceso

A continuación se presentará el simulador HTST 1.0 desarrollado para un equipo pasteurizador de leche (Tarifa y col., 1997) con el que se analizarán las principales características y usos de los simuladores de tiempo real. El proceso simulado es mostrado en la Figura 6.

La leche fresca, después de la filtración o clarificación centrífuga, debe someterse rápidamente a la pasteurización. Se necesita este tratamiento para destruir las formas vegetativas de algunas bacterias patógenas y sobre todo especies que frecuentemente originan infecciones graves y epidemias. La pasteurización también elimina un gran número de bacterias no patógenas, como son las bacterias lácticas, siempre presentes y susceptibles de alterar la leche. La pasteurización destruye además ciertas enzimas, en especial la lipasa, cuya actividad es indeseable. Por lo tanto, la pasteurización no sólo sanea la leche sino que también prolonga el tiempo de conservación. Como la leche pasteurizada no es totalmente estéril, debe enfriarse rápidamente hasta 5 ºC y almacenarse refrigerada, con el fin de evitar la proliferación de bacterias termoresistentes.

La pasteurización se lleva a cabo a 63 ºC durante 30 minutos, entre 72-75 ºC durante 15 segundos o bien instantáneamente a 95 ºC. Algunos consideran que la temperatura de pasteurización es 72 ºC en 15 segundos mínimo y otros lo hacen a 79 ºC entre 20-25 segundos y se enfría a 7.2 ºC o menos. La pasteurización a 63 ºC se

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

efectúa en tanques cerrados, provistos de agitadores; las pasteurizaciones rápidas a temperaturas elevadas, se hacen en cambiadores de calor tubulares o de placas.

La Figura 6 muestra el proceso que será simulado, se trata de un pasteurizador del tipo HTST (*High Temperature - Short Time*, Temperatura Alta - Tiempo Corto). La corriente *FL1* es la corriente de leche fresca que alimenta al equipo, su temperatura es 4 C. Esta corriente se mezcla con la corriente *FL11* con el fin de elevar su temperatura.

La corriente resultante es alimentada al equipo *ICP*. Este equipo es un intercambiador de calor que precalienta la leche fresca al tiempo que enfría la leche ya pasteurizada, corriente *FL7*. La corriente precalentada, *FL3* es impulsada por una bomba de engranajes *B1* hacia el calentador *ICC*. En este equipo la leche es calentada con vapor hasta alcanzar la temperatura de pasteurización fijada en 75 °C. Esta temperatura se mantiene durante aproximadamente 26 segundos en el equipo *TP*. Este equipo es simplemente un tubo adiabático. El controlador *CT* es del tipo P+I (acción Proporcional e Integral) y controla la temperatura de salida de *TP* regulando la apertura de la válvula *V1*.

Una fracción de la leche pasteurizada es recirculada para elevar la temperatura de la alimentación, y la restante se utiliza en el precalentador *ICP*. Finalmente, la leche es enfriada utilizando amoníaco en el equipo *ICE*.

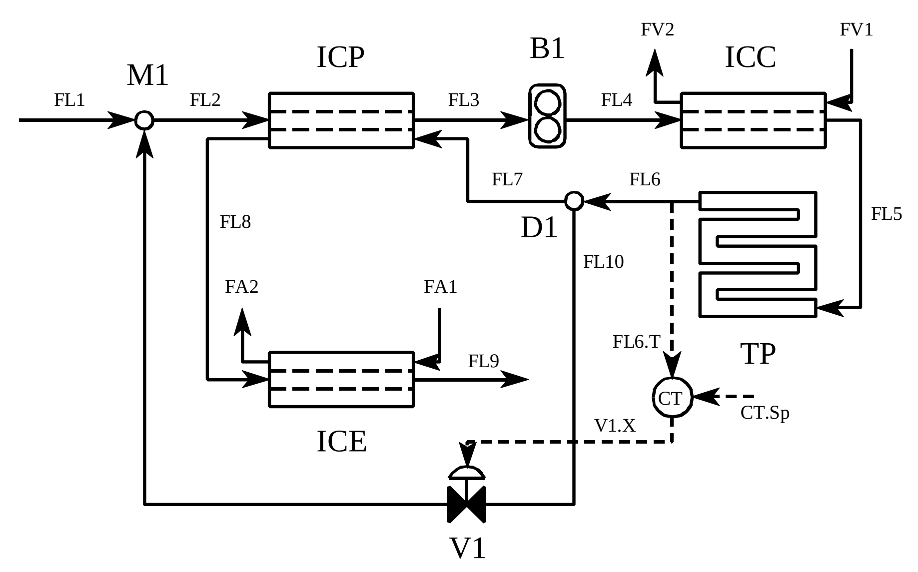


Figura XXI.6: Pasteurizador HTST.

Algunas de las características de los equipos utilizados son:

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

- *Mezclador (M1):* Es una conexión cuyo objeto es unir dos corrientes para formar una tercera. La nueva corriente tiene distintas propiedades y variables de estado.
- *Bomba (B1):* Cumple la función de proporcionar energía con el objeto de impulsar la leche. De los distintos tipos, se seleccionó una bomba de engranajes rotatorios, que es de desplazamiento positivo. Los espacios entre los dientes de los engranes que están a la entrada de la bomba son llenados por el líquido; cuando el engrane gira, el líquido es atrapado entre el diente y el cuerpo de la bomba, posteriormente es liberado en la línea de descarga. Con estas bombas se pueden manejar cualquier tipo de líquido libre de abrasivos y son indicadas para fluidos de alta viscosidad. Las bombas rotatorias son capaces de entregar una capacidad aproximadamente constante contra cualquier presión dentro de los límites de diseño de la bomba. El flujo de descarga varía directamente con la velocidad y está casi libre de pulsaciones.
- *Intercambiador de Calor, Precalentador (ICP):* Es un dispositivo de doble tubo que se utiliza para precalentar la alimentación con una corriente de fluido caliente que circula por el ánulo. En el estado estacionario, la corriente del ánulo tiene la temperatura de pasteurización. Se trata de aprovechar el calor sensible de la corriente caliente que sale del tubo pasteurizador y que debe ser enfriada a una temperatura aproximada de 4 °C. El reciclo de leche es necesario para lograr un proceso continuo que alcance la temperatura de pasteurización.
- *Intercambiador de Calor Calentador (ICC):* También es de doble tubo. Su misión es entregar a la corriente proveniente del ICP, previo paso por la bomba, la energía calórica necesaria para que la corriente de salida alcance la temperatura de pasteurización que es de 75 °C. El aporte de calor se realiza mediante una corriente de vapor que circula por el ánulo. La misma tiene una temperatura de 135 ºC y una presión de 8 atm. El calor intercambiado es equivalente al calor latente correspondiente a la cantidad de vapor condensado.
- *Intercambiador de Calor Enfriador (ICE):* Se utiliza como medio refrigerante el amoníaco, que tiene un punto de ebullición de -33 °C a la presión atmosférica. El objeto del equipo es enfriar la corriente de leche que sale del ICP hasta la temperatura de 4 °C.
- *Tubo Pasteurizador (TP):* Tiene el objeto de mantener la leche durante un tiempo de 25 segundos a la temperatura de 75 °C, razón por la cual se utiliza un tubo totalmente aislado (adiabático).
- *Controlador de Temperatura (CT):* Examina la temperatura (variable controlada) de salida del pasteurizador, para controlar con mayor precisión el proceso. La acción se logra a través de un control manual (operador) o a

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

través del control automático (por medio de instrumentos). En el caso del control manual, el operador en base a medidas periódicas de la temperatura a la salida de TP actúa sobre la válvula V1; por ejemplo, si la temperatura es inferior al valor deseado, aumenta la recirculación de leche abriendo la válvula. Este caso es importante cuando se realiza la puesta en marcha del pasteurizador. En el control automático se emplea un dispositivo sensible a la temperatura para producir una señal proporcional a la temperatura medida. Esta señal se alimenta a un controlador que la compara con un valor deseado preestablecido, *set point*. Si existe diferencia, el controlador cambia la abertura de la válvula de control para corregir la temperatura.

- *Válvula (V1):* Controla el flujo de la corriente que la atraviesa. Permite controlar el flujo de líquido en forma automática o manual con el objeto de alcanzar la temperatura de pasteurización.
- *Divisor (D1):* Divide una corriente en dos, aquí se mantiene la composición, la temperatura, la presión (obviamente descontando la pérdida de carga), etc.. Este equipo es necesario para poder reciclar una parte del caudal para lograr la temperatura requerida a la salida del ICC.

XXI.4.2 Propiedades fisicoquímicas

A continuación se hará referencia a las propiedades de la leche entera que se utilizarán para el modelado del proceso de pasteurización. Nuevamente, en este ejemplo se pretende poner de manifiesto la frecuencia con la cual el usuario debe recurrir a correlaciones específicas de propiedades físico-químicas, ya que difícilmente las propiedades de la leche se obtengan de un banco de datos de simuladores de propósitos generales.

* *Punto de congelación*

El punto de congelación es una de las constantes físicas más estable de la leche. El punto de congelación de la leche entera puede oscilar entre -0.52 ºC y -0.56 ºC.

* *Punto de ebullición*

El punto de ebullición es de 100.5 ºC, a presión normal.

* *Densidad de la leche*

La densidad relativa media a 15 ºC/15 ºC es de 1.032 con un rango de 1.028-1.035. Esta varía con la temperatura y la densidad de cada uno de sus componentes. En la leche entera es conveniente medir la densidad a 30 ºC para que la materia grasa esté en su estado líquido, ya que en estado sólido la grasa tiene una densidad superior y es bastante elevada. La densidad relativa de los componentes de la leche entera a 30 ºC es: materia grasa 0.913, sólidos no grasos 1.529, lactosa 1.523, proteínas 1.35 y

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

cenizas 5.5. Conociendo la composición de la leche se puede calcular la densidad con la siguiente ecuación:

$$\delta_{leche} = \frac{100}{\frac{\%MG}{0.913} + \frac{\%L}{1.63} + \frac{\%P}{1.35} + \frac{\%C}{5.5} + \frac{\%Agua}{1}} \quad \textbf{(16)}$$

donde:
MG : materia grasa.
L : lactosa.
P : proteína.
C : cenizas.

La densidad de la leche varía en el rango de temperatura de trabajo, para considerar la misma se determinó una relación que se ajusta de la mejor forma a los datos experimentales.

$$\rho(T) = 1035.705 - 0.33462\ T \quad \textbf{(17)}$$

** Calor específico*

El calor específico es variable según el contenido graso. El valor medio para la leche entera es de 0.93 cal/g ºC, para la leche desnatada de 0.95 cal/g ºC, y para la nata con un 40 % de materia grasa de 0.68 cal/g ºC. En nuestro caso, para el rango de temperaturas de trabajo se considera que el mismo es constante.

** Viscosidad de la leche*

La viscosidad de la leche es función del número y tamaño de las partículas y también de la temperatura. La viscosidad de la leche entera es de 2.1 cP y de la leche desnatada es 1.8 cP. Para considerar la variación de la viscosidad con la temperatura se utilizó la fórmula de Andrade.

$$\mu(T) = e^{-7.36228 + \frac{2396.814}{T + 273.15}} \quad \textbf{(18)}$$

Conductividad térmica de la leche

La conductividad térmica de la leche es de 0.53 W/(m ºC) a 25 ºC y en el rango de temperatura de trabajo puede considerársela constante.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

XXI.5 MODELO DEL PROCESO

El modelo del proceso fue desarrollado de acuerdo a lo planteado en los capítulos anteriores. El enfoque elegido fue el orientado a ecuaciones debido a que permite maximizar la velocidad de resolución. De esta manera, el modelo está constituido por un sistema de ecuaciones algebraicas y por otro de ecuaciones diferenciales; éstas últimas son las responsables de la dinámica del proceso (ver sección III.1). En cuanto al modelado de ruidos y fallas, se procedió de acuerdo a lo explicado en la sección III.2 de este capítulo.

El modelo del tubo pasteurizador TP es un modelo especial. Este equipo es un tubo adiabático que introduce una demora pura en el sistema. El modelo podría ser una ecuación diferencial parcial, ya que la temperatura en su interior es función tanto del tiempo como de la coordenada espacial. Sin embargo, esto perjudicaría la velocidad de la simulación al tener que resolver, por un lado, un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias y, por otro, un sistema de ecuaciones diferenciales parciales.

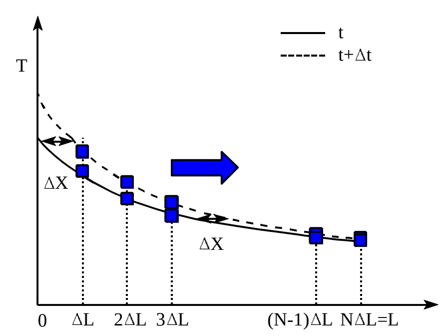


Figura XXI.7: Perfiles de temperatura en TP.

A fin de modelar el equipo TP con exactitud pero sin sacrificar velocidad, se modeló este equipo mediante un algoritmo que contiene implícitamente una solución simplificada de la ecuación diferencial parcial. En la Figura 7 se puede ver el perfil de temperaturas en el instante t y el perfil de temperatura en el instante $t+\Delta t$. La separación entre ellos es ΔX, este es el espacio que avanza el fluido durante Δt. El modelo registra las temperaturas del fluido cada ΔL a lo largo del tubo de longitud L. Entonces, el problema es: conocidas las temperaturas en todos los puntos de registro y el ΔX para el tiempo t, y dada la nueva temperatura de entrada para el tiempo $t+\Delta t$, calcular las nuevas temperaturas para todos los puntos de registro.

El modelo de TP también considera la caída de presión provocada por su longitud y su forma. Esta parte es idéntica al modelo que se utiliza para la tubería del proceso. Lo mismo ocurre con los tubos de los intercambiadores. Dado que existen similitudes ente varios equipos, y entre varios parámetros, además de la caída de

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

presión, en la implementación del simulador se optó por un lenguaje orientado a objetos. De esta forma, se define una clase TTubo que contiene el modelo de cálculo de la caída de presión. A esta clase pertenecen las tuberías del proceso. Por otro lado, de esta clase se derivan otras como ser la clase TTP. A esta clase pertenece el equipo TP. Al ser derivada de TTubo, esta clase hereda el modelo para la caída de presión y no es necesario repetir el mismo para el equipo TP. De esta manera se logran ciertas ventajas de programación, aunque no serán discutidas aquí por estar fuera del alcance de esta obra. No obstante, al igual que lo comentado en el Capítulo I, vemos que para aplicaciones cada vez más sofisticadas son muy importantes los lenguajes con capacidades gráficas, manejo de objetos, y otras facilidades, tales como el visual C^{++}, Delphi, etc.

XXI.6 EL SIMULADOR HTST 1.0

XXI.6.1 Introducción

En esta sección se analizarán algunas características de un prototipo desarrollado para el pausterizador HTST. El mismo posee facilidades típicas a los pocos simuladores comerciales de tiempo real disponibles a la fecha, y a ellas se suman la simulación de ruidos y fallas. También se analizarán diversas aplicaciones sobre el proceso, como ser: operaciones de arranque, parada, simulación de fallas, etc..

En cuanto al aspecto computacional, se notará claramente las ventajas de utilizar lenguajes y sistemas operativos de última generación (Windows 95, programación orientada a objetos, entornos visuales o gráficos, etc). Si bien, como se ha discutido en el capítulo I es posible programar módulos específicos similares al prototipo HTST con lenguajes tradicionales (primeras versiones de FORTRAN, PASCAL, BASIC, etc.), esto requiere de un enorme esfuerzo.

No obstante, se vuelve a enfatizar que no es el objetivo de esta obra el discutir y/o ejemplificar los procedimientos de implementación de los respectivos módulos y/o simuladores en general. Sólo se mencionarán algunos puntos básicos para orientar al lector con mayores inquietudes hacia las ramas de la informática que deberán ser profundizadas si se pretende encarar dicha tarea con éxito.

XXI.6.2 La interfaz

En forma muy general, un simulador de tiempo real posee cuadros o cajas de diálogo al igual que cualquiera de los utililitarios comunes que se utilizan bajo el entorno de Windows. A los efectos de poder ser utilizados como un entrenador, es importante además que la arquitectura y distribución de las pantallas sean muy similares a las que se utilizan generalmente en los paneles de la sala de control del proceso simulado.

En el caso que se analiza, la pantalla o ventana principal del HTST reproduce los elementos que se encuentran en la sala de control del proceso según se indica en

la Figura 8. Como se observa, existen zonas bien diferenciadas:

1. Barra de Menú.
2. Barra de Botones.
3. Mesa de Control.
4. *Flowsheet*.
5. Registrador.
6. Barra de *Scroll*.
7. Botón de Apagado/Encendido.
8. Cronómetro.
9. Zoom.
10. Indicadores.

La función de la Barra de Menú y Barra de Botones es la de permitir controlar la operación del simulador. Por ejemplo: el manejo de archivos, el inicio o finalización de la simulación, etc..

La Mesa de Control dispone de todos los elementos con los que cuenta el operador para supervisar y controlar el proceso real. Se tienen Indicadores que reportan los valores actuales de caudales, presiones y temperaturas. Cuando la importancia de las variables medidas lo justifica, se utilizan Registradores que permiten visualizar la evolución de cada una de ellas. Un dispositivo de esta clase simula un rollo de papel que se mueve de derecha a izquierda, a velocidad constante, mientras sobre él se grafican las lecturas correspondientes. También se pueden encontrar alarmas; éstas son utilizadas para llamar la atención del operador sobre alguna variable importante que está fuera de los valores normales. Finalmente, se cuenta con botones y cursores que permiten el encendido/apagado de algunos equipos y el ajuste de sus parámetros respectivamente.

Entre la barra de botones y hasta la parte central del formulario se presenta un diagrama de flujos cualitativo del proceso de pasteurización. En éste se muestran los equipos que componen el proceso y las corrientes que los conectan. Cada corriente y cada equipo posee un rótulo con el nombre que los identifica. Este *Flowsheet* está visible permanentemente cumpliendo la misión que desempeña un diagrama real en la sala de control y es un componente con el que cuenta habitualmente. Es importante que el operador tenga siempre presente la topología del sistema; esta información es útil para realizar análisis de causa-efecto necesarios para la supervisión y control del proceso.

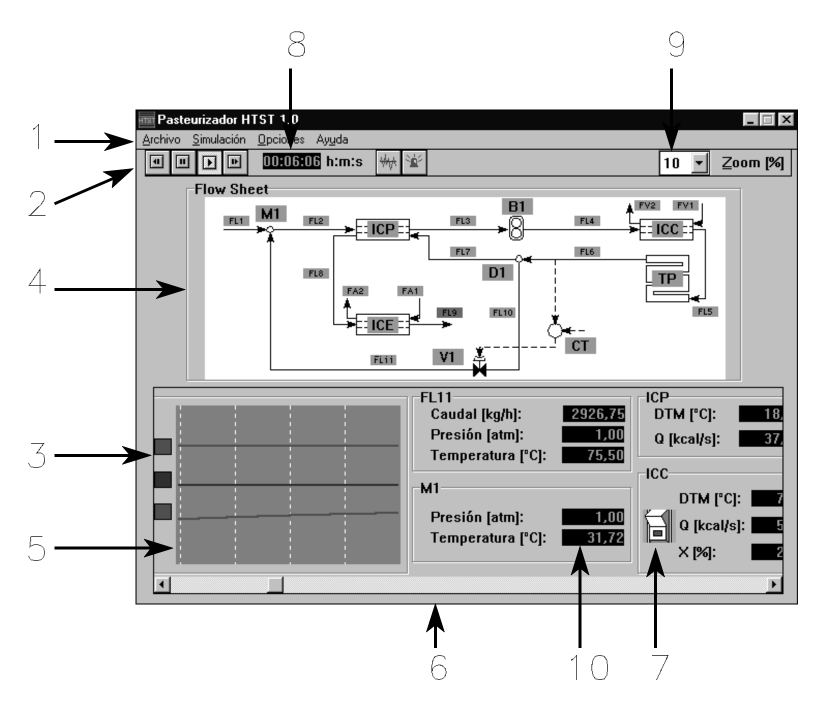


Figura XXI.8: Interfaz del simulador HTST 1.0.

En la parte inferior del *Flowsheet* se encuentra la Mesa de Control. Es conveniente que la misma se pueda recorrer fácilmente (por ejemplo utilizado la barra de *scroll* en este prototipo). De esta manera, se pueden visualizar las distintas secciones de instrumentos que están asignadas a las corrientes y los equipos, estas secciones se denominan Paneles de Instrumentos. También el mismo efecto se puede lograr más rápidamente mediante una pulsación con el *mouse* sobre el rótulo del equipo o corriente cuyo Panel de Instrumentos se desea visualizar. Para facilitar estas tareas, generalmente se programan diversos efectos de resaltado, por ejemplo: el rótulo seleccionado cambia su color de verde a violeta, la mesa de control se desplaza automáticamente para mostrar el Panel de Instrumentos correspondiente, y se destaca el panel activo cambiando el color de las letras.

Un punto que debe ser siempre considerado en el diseño de la interfaz es que se debe contar con un acceso rápido a las alarmas, enclavamientos u otros tipos de elementos de seguridad que disponga el proceso. Esto se hace a través del *Flowsheet* y de la Mesa de Control. Por ejemplo, las temperaturas de las corrientes FL5 y FL9 están dotadas con alarmas que se activan cuando estas variables se alejan de los valores normales. Cuando esta situación se presenta, los rótulos correspondientes

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

cambian de color en forma intermitente. Lo mismo ocurre con las marcas de referencias que tienen los Registradores en la Mesa de Control.

Finalmente, cuando el simulador suspende la simulación sin el pedido expreso del usuario, la interfaz debe explicar adecuadamente al usuario los motivos de esta interrupción. El simulador detendrá la simulación cuando el estado del proceso evolucione más allá de los límites para los cuales fue desarrollado el modelo. Por ejemplo, si no se ejecutan las debidas acciones, se puede producir un congelamiento de leche en el equipo ICE. Lo que ocurre luego de ese evento no está contemplado en el modelo, por lo tanto la simulación se detendrá, y la interfaz informará esa situación al usuario.

XXI.6.3 Aplicaciones

En esta sección se comentan varias aplicaciones que demuestran el potencial del simulador que se está presentando en particular, y de los Simuladores Dinámicos de Tiempo Real en general.

- **Puesta en marcha de los equipos**

En cualquier planta esta operación debe realizarse al menos una vez. En el proceso que se está analizando, la puesta en marcha debe hacerse diariamente. Como se verá, esta operación es de cuidado, debido a que el proceso no está en condiciones estacionarias sino que evoluciona permanentemente. En esta etapa el operador debe supervisar y controlar la evolución de forma que el proceso finalmente entre en régimen alcanzando el estado estacionario que corresponde al funcionamiento normal.

Lamentablemente, tanto los operadores como los estudiantes de ingeniería no están tan familiarizados con los estados transitorios como lo están con los estados estacionarios. Por el mismo motivo, son poco comprensibles las complicadas secuencias de operaciones que constituyen una puesta en marcha. En este caso, el simulador es ideal para que se obtengan estos conocimientos y habilidades por propia experiencia. A fin de ver cómo esto es posible, a continuación se describe un intento de puesta en marcha tal como lo encararía una persona sin experiencia en el proceso que se está analizando.

Primero se debe llevar el proceso a su estado inicial, para ello se presiona el botón Iniciar. Esto hace que la bomba B1 comience a funcionar impulsando la leche a través de todo el circuito. De esta manera se tiene leche circulando a 4 °C en todos los equipos.

Activada la simulación, el cronómetro comienza a contar el tiempo a la vez que los Registradores comienzan a graficar los valores de las variables correspondientes. Sin embargo, todas las variables mantienen su valor, lo único que se está haciendo es introducir leche por FL1 y sacarla por FL9. El problema es que todavía no se está pasteurizando. Esta situación es reportada por la alarma de temperatura de FL5 que se activa debido a la baja temperatura.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Aparentemente, la próxima acción debe ser encender el equipo calentador ICC. En nuestro prototipo se logra pulsado el botón de encendido que se encuentra en el Panel de Instrumentos del equipo ICC. Inmediatamente, la temperatura de FL5 comenzará a aumentar.

Pasado un cierto tiempo, se observa que la temperatura de la corriente de salida FL9 también comienza a aumentar, hasta que se activa la alarma de FL9 indicando que la leche está saliendo a una temperatura más alta que la normal. Entonces, parece que es el momento de encender el equipo enfriador ICE. Los pasos para encender el equipo ICE son similares a los que se ejecutaron para el equipo ICC.

Al tiempo que esto ocurre, la alarma de temperatura de FL5 sigue mostrando que aún no se alcanzó la temperatura de pasteurización. Parece lógico intentar acelerar el calentamiento abriendo la válvula V1 para aumentar la recirculación. Para ello, se debe colocar el control CT en el modo manual y se debe actuar sobre el cursor que regula la apertura V1 y que se encuentra en el correspondiente Panel de Instrumentos.

Mientras se está realizando esta tarea, aparecerá sorpresivamente un mensaje indicando "*Leche congelada en ICE*", la simulación se detiene automáticamente. Analizando las lecturas en la mesa de control se podrá verificar que efectivamente la corriente FL9 alcanzó una temperatura inferior a la temperatura de congelamiento de la leche. Este congelamiento se produjo porque el equipo enfriador ICE fue encendido prematuramente. Esto es, la temperatura a la entrada del equipo ICE todavía no era suficiente para evitar que la leche se congelara al encenderse el equipo ICE. Si bien el equipo ICE fue encendido porque la alarma de la corriente de salida indicaba que la temperatura era alta, debe tenerse en cuenta que la alarma fue ajustada para supervisar al proceso durante la operación normal y no durante la puesta en marcha. Algo similar ocurre con los controladores, estos deberán ser puestos en modo manual durante la puesta en marcha.

Es interesante analizar las consecuencias de esta puesta en marcha defectuosa. Al congelarse la leche en ICE, se produce una obstrucción en la descarga del sistema. Esto hará que el resto de la leche sea recirculada en su totalidad por el equipo calentador ICC, y la temperatura se elevará hasta quemarla. Por otra parte la bomba B1 estará sobrecargada y se correrá el riesgo de averiarla. Todo esto forzará una parada de emergencia, y luego se deberá perder tiempo y dinero en la reparación de los equipos afectados.

Es evidente que si el modelo está bien planteado y responde dentro de márgenes aceptables a la realidad del proceso, un simulador de este tipo permite encontrar fácilmente respuesta a algunas de las siguientes cuestiones: ¿Cuáles son los pasos óptimos a seguir durante la puesta en marcha?, ¿Cómo evolucionan las variables del proceso?, ¿En que tiempo se alcanza el estado estacionario?, ¿Cuál es el tiempo mínimo para la puesta en marcha de los equipos?.

Con este simulador es posible ensayar distintas alternativas de secuencias de

operación a realizar durante la puesta en marcha. La mejor será aquella que minimice el tiempo que demora el proceso en alcanzar el estado estacionario, o que haga también mínima la cantidad de leche mal pasteurizada. Para esta tarea se podrá emplear alguna técnica de optimización. O simular diversas alternativas y evaluar los resultados.

- **Parada de planta**

En general, todo proceso debe en algún momento detenerse ya sea por reparación, mantenimiento, cambio de la naturaleza de la alimentación, etc.; esto se denomina "parada de planta". Durante la misma, la planta abandona el régimen estacionario de operación normal para evolucionar hacia un nuevo estado (planta detenida). El procedimiento óptimo de parada debe minimizar la cantidad de producto fuera de especificación y evitar situaciones inconvenientes durante el transiente. Nuevamente, el simulador es una herramienta ideal para determinar este procedimiento y contestar preguntas tales como: ¿Cuánto tiempo llevará detener la planta?, ¿Cuánto producto se perderá?, ¿Cuáles serán los equipos que deberán recibir mayor atención durante la parada?.

En el pasteurizador, una vez que se ha procesado la casi totalidad de leche fresca, se debe detener el funcionamiento de los equipos. Una solución aceptable, que se logra experimentando con el simulador, es apagar los equipos ICC, ICE y CT simultáneamente y luego apagar la bomba B1. Esto hace que la toda la leche que sale hasta que se detiene la bomba esté pasteurizada, mientras que sólo queda sin pasteurizar la leche que quedó retenida en los equipos. Observe que lo más importante de este procedimiento es que la bomba se apaga al final, de lo contrario se correría el riesgo de quemar la leche en el calentador ICC o de congelarla en el enfriador ICE.

- **Ajuste de controladores**

Una vez realizada la etapa de puesta en marcha del simulador, lo que implica haber alcanzado las condiciones estacionarias en el proceso de pasteurización, se puede estudiar la conducta del controlador CT. Si su conducta no es adecuada, se deberán ajustar adecuadamente los valores de los parámetros del controlador; en este caso: Kc y Ti. Para esto, se pueden utilizar las técnicas comentadas en el Capítulo XVI.

Una de las pruebas que se puede realizar es introducir una perturbación escalón a través del *set point*; por ejemplo, llevarlo de 75 ºC a 79 °C. Esto se hace utilizando el cursor correspondiente del panel de instrumentos del controlador (Figura 9) durante la ejecución de la simulación. Para los valores iniciales de los parámetros de CT, la Figura 9 muestra que la temperatura controlada se aproxima asintóticamente al nuevo valor.

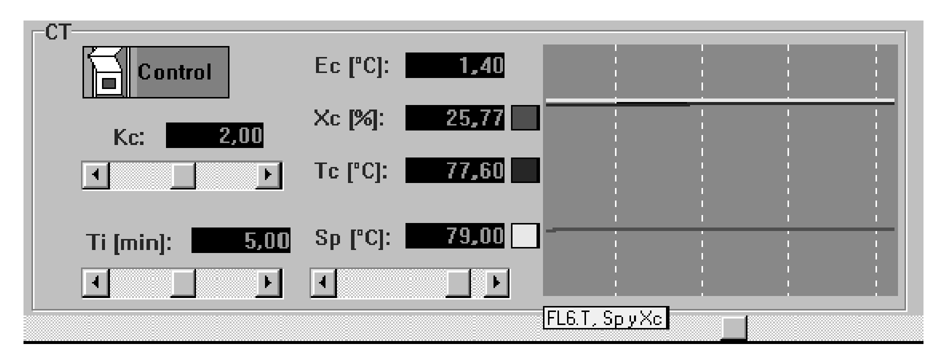


Figura XXI.9: Panel de Instrumentos del controlador CT.

Experimentos de este tipo son útiles para responder a las siguientes preguntas: ¿Cómo evolucionan los valores de las variables y de los Registradores ante este cambio?, ¿Se presentan estados peligrosos o inconvenientes?, ¿Se alcanza el nuevo valor del *set point*?, ¿Alcanza el proceso un nuevo estado estacionario?, ¿Cuánto tiempo demora el proceso en estabilizarse?. Estas respuestas ayudarán a encontrar los valores óptimos de Kc y Ti; es decir, aquellos que hacen que la variable (la temperatura de la corriente FL6) controlada alcance el nuevo valor del *set point* en el mínimo tiempo.

- **Simulación de ruido**

Como ya se mencionó en secciones anteriores, las variables de los procesos reales están afectadas por ruidos. También, se comentó la necesidad de simular estos ruidos a fin de entrenar a los operarios. El simulador HTST 1.0 es capaz de incorporar la simulación de ruidos tanto del proceso como de los instrumentos de medición. Para ello sólo debe presionarse el botón correspondiente en la barra de botones, o seleccionar Ruidos en el menú de Opciones. Activada esta opción, se observará que en los Registradores e Indicadores se reportan lecturas oscilantes. En la Figura 10 se muestra la situación descripta.

Es interesante observar el comportamiento de los controladores ante esta nueva situación. El ruido pone a prueba la estabilidad de los mismos. En el caso del pasteurizador, la estabilidad es un elemento que no se tuvo en cuenta en la sección dedicada al ajuste de Kc y Ti. Por lo tanto, se deberá analizar si el comportamiento del controlador CT continúa siendo adecuado cuando se simula el ruido.

También es interesante analizar en que grado son afectadas por los ruidos las variables del proceso. El operador deberá familiarizarse con los distintos niveles de ruido a fin de no provocar falsas alarmas, o de no pasar por alto verdaderos estados anormales enmascarados por los ruidos.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

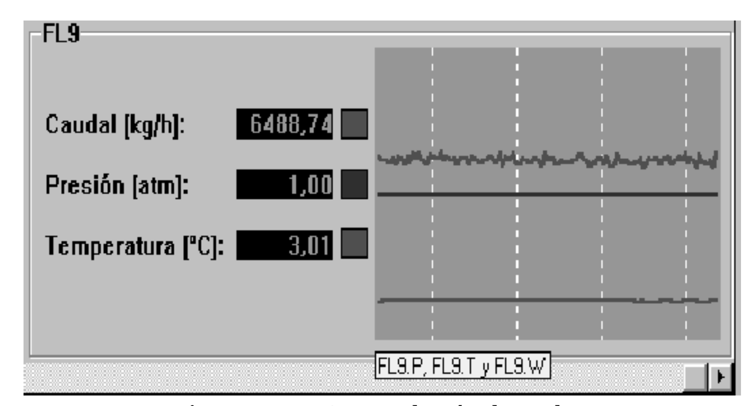


Figura XXI.10: Simulación de ruidos.

- **Simulación de fallas**

Otro de los problemas con los que seguramente puede enfrentarse un operador en una planta química es la ocurrencia de diversas fallas. Este tema se ha discutido ya en los capítulos anteriores, al ejemplicar la simulación de casos específicos.

El simulador HTST 1.0 es capaz de simular fallas en el pasteurizador. Esto se realiza activado la simulación de fallas al presionar el correspondiente botón en el menú de botones, o al seleccionar la opción Fallas en el menú Opciones. Al proceder de esta manera, se presenta al usuario el Cuadro de Fallas que permite seleccionar la falla a simular y sus características (Figura 11). Las características programables son: el tiempo de activación (el momento en que ocurrirá la falla), amplitud (magnitud de la perturbación provocada por la falla), tiempo de desarrollo (tiempo que tardará la perturbación provocada por la falla en alcanzar la amplitud programada). Seleccionando valores adecuados para estas características es posible simular fallas débiles, graves, graduales, y repentinas.

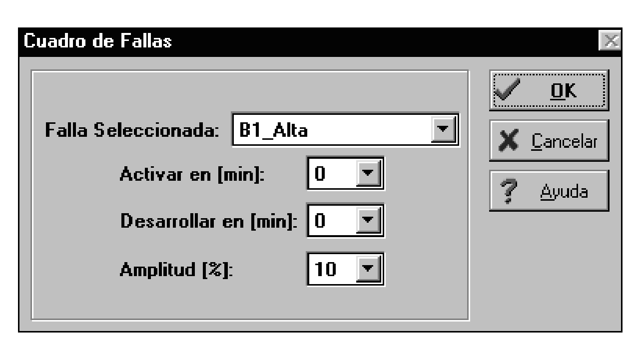


Figura XXI.11: Cuadro de Fallas.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Es conveniente dividir el plan de prácticas en dos fases. La primera es la fase de entrenamiento. En ella se debe permitir al operador experimentar provocando distintas fallas a fin de obtener experiencia sobre la conducta del proceso. Esto le permitirá analizar las consecuencias originadas por las fallas y elaborar un plan de acción para minimizarlas. Una vez completada esta fase se puede ejecutar la fase de diagnóstico. En esta fase, el simulador se utiliza para evaluar la capacidad del operador para manejar situaciones provocadas por fallas. Para ello, primero la falla debe ser programada por el entrenador, luego el operador deberá supervisar el proceso simulado sin conocer la naturaleza de la falla programada. La evaluación se hará en base al tiempo que demora el operador en detectar que el proceso está siendo afectado por una falla, el tiempo que demora en identificar el equipo fallado, y las acciones que toma para minimizar las consecuencias.

Para aclarar lo anterior, se verán algunos ejemplos de simulación de fallas. Primero, se puede programar la falla B1_Baja al 20%, con tiempo de activación igual a 2 minutos y un tiempo de desarrollo de 1 minuto. Esta falla hace que la bomba B1 impulse un caudal menor al normal. La Figura 12 muestra algunos de los síntomas provocados por esta falla. Obsérvese que no sólo los caudales son afectados por la falla.

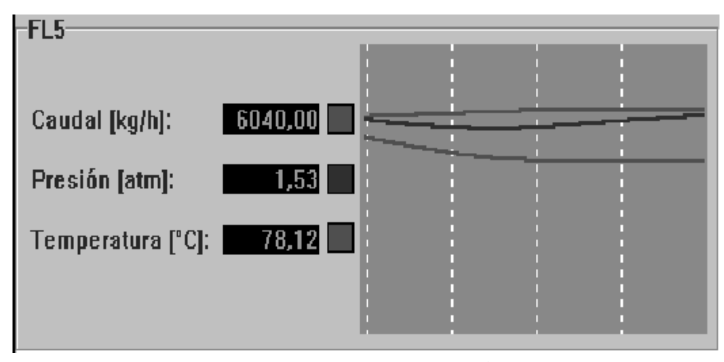


Figura XXI.12: Algunos síntomas de la falla B1_Baja 20%.

Es responsabilidad del operador tomar las acciones correspondientes para normalizar el proceso o minimizar las pérdidas. Para tomar una buena decisión, el operador deberá analizar las posibles causas y consecuencias del actual estado del proceso. Con respecto a las causas, a partir de las lecturas reportadas en el panel de control, el operario debería ser capaz de determinar que la presente situación es debida a una falla en la bomba. Luego, deberá informarlo al grupo de mantenimiento. Con respecto a las consecuencias, a partir de las tendencias de las lecturas, el operador debe identificar estados peligrosos inminentes; luego, deberá adoptar las medidas pertinentes para evitar que el proceso evolucione hacia dichos estados.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

En el ejemplo que se está analizando, la simulación predice que el proceso se estabilizará sin la intervención del operador (tal como lo indican las tendencias observadas en la Figura 12). Esto significa que el operador podría abstenerse de intervenir para no complicar aún más la situación.

Por otra parte, para la misma falla (B1_Baja) pero con una amplitud mayor (50%) la conducta del proceso cambia dramáticamente. Luego de transcurrido un cierto tiempo aparecerá un mensaje en la mesa de control, como se aprecia en la Figura 13.

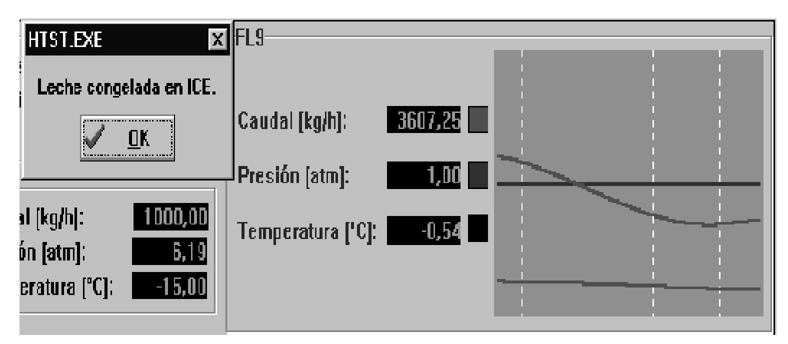


Figura XXI.13: Algunos síntomas de la falla B1_Baja 50%.

Con este caso el sistema evoluciona a un estado peligroso donde la leche se congela. El operador debe intervenir a fin de evitar una parada de emergencia. El mensaje de leche congelada aparece porque la temperatura en la corriente FL9 es inferior al punto de congelamiento de la leche (-0.5 ºC). Note que, para el mismo tipo de falla se obtienen efectos diferentes. En este caso amplitudes distintas provocaron las dos situaciones planteadas. En la primera el operador puede no intervenir mientras en la segunda sí lo debe hacer.

Es de destacar las dificultades que debe enfrentar el operador ante situaciones anormales. Primero debe identificar la causa (la falla), para ello debe ser capaz de superar los inconvenientes originados por el ruido, el *stress*, la complejidad de las lecturas, etc.

Utilizan un modelo de causa-efecto del proceso, a los fines de vincular las desviaciones (positivas, negativas) de una variable con todas las demás. Según comentamos someramente en el Capítulo V al clasificar los simuladores por su tipo, esto puede realizarse por medio de técnicas de simulación cualitativa, la que nos brinda las propagaciones de todas las perturbaciones a lo largo del proceso.

Luego, utilizando técnicas de inteligencia artificial, puede encapsularse, como someramente comentamos en el Capítulo I, el conocimiento (modelo cualitativo) anteriormente descrito.

Dentro de este contexto, puede construirse un sistema experto (diagnosticador de fallas en tiempo real) que recibiendo las señales del estado de las variables del proceso instante a instante, determine las desviaciones respecto al estado normal, y trate de encontrar, en la base de conocimientos, cuál de los patrones de desviaciones simulados previamente (por ejemplo fallas en las bombas, válvulas, etc) concuerda en mayor grado con los síntomas actuales. Esta es la falla que se reportará como las más probable.

En otras palabras, el sistema actúa "emulando" al operador experto ante la situación de diagnosticar una falla.

Estos sistemas siempre se utilizan para asesorar al operador, no para suplantarlo, es decir, que no se conectan al proceso para "tomar acciones" por sí solos. Para evaluar su performance, pueden ser conectados un simulador en tiempo real, el cual genera señales de la planta en estado fallado en tiempo real, mientras que el diagnosticador va emitiendo la falla más probable en tiempo real. De esta forma pueden evaluarse el tiempo de reacción, la exactitud, versatilidad, etc.

Luego, el operador deberá ejecutar el correspondiente plan de acción indicado en los manuales de procedimientos. Sin embargo, para que el operador se desempeñe adecuadamente, es vital que posea un buen entrenamiento y esté familiarizado con situaciones anormales. Es para este entrenamiento, que un simulador de tiempo real es una herramienta insustituible.

En este capítulo se han comentado las principales características y aplicaciones de los simuladores de tiempo real. Se discutió también la estructura básica de un simulador de este tipo, y se presentaron modelos para simular ruidos y fallas. Finalmente, se centró la atención sobre un simulador específico, el HTST 1.0. Con este simulador se analizó la utilidad de los simuladores de tiempo real.

En base al estado actual de desarrollo y la utilidad que presentan estos simuladores, es de esperar un gran crecimiento en la oferta comercial. De esta manera, los simuladores de tiempo real ocuparán un espacio cada vez mayor en las Universidades y las Empresas.

Son estos los motivos que impulsaron a numerosos grupos de investigación y departamentos de desarrollo a intentar la creación de Sistemas de Diagnóstico de Fallas para asistir a los operarios ante estas situaciones. Los Sistemas de Diagnóstico procesan las lecturas de las variables del proceso para asesorar al operador sobre las posibles causas del estado anormal.

PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) Listar las principales diferencias entre un simulador dinámico en tiempo real y un simulador convencional. Cuál es a su juicio el principal inconveniente para construir un simulador de estas características para una torre de destilación por el método riguroso discutido en el capítulo XV?.

P2) Debido a qué causa los métodos de programación convencionales dificultan la

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

confección de simuladores de este tipo?.

P3) Qué debe tenerse en cuenta principalmente cuando se utiliza el modelo de un equipo para simular sus modos de fallas?.

P4) Es posible programar un simulador en tiempo real genérico como los existentes para simulación dinámica en el mercado?. Mencione algunos de los factores más restrictivos para esta opción.

P5) Puede utilizar un simulador dinámico en tiempo real para verificar un controlador (por ejemplo un PID) en su desempleño debido a perturbaciones en el proceso?.

BIBLIOGRAFÍA

- Tarifa E.E., "Diagnosis de Fallas en Plantas Químicas Complejas: Plantas de Grandes Dimensiones y Procesos Batch", Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina, 1995.
- Tarifa E.E., Humana D., Vázquez G., Franco S., Scenna N.J., "Simulación Dinámica en Tiempo Real. Pasteurizador HTST", *UNJu*, 1997.

ISBN: 950-42-0022-2 - ©1999

Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos

Fe de Erratas

Prólogo:

El presente documento contiene las correcciones a los errores del libro Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos del Dr. Nicolás José Scenna y colaboradores en su edición original. Cabe aclarar que dichos errores ya han sido corregidos en la versión electrónica de este mismo sitio.

Como aclaración, mencionaremos, que la información está ordenada en dos columnas, la columna izquierda contiene la información errónea mientras que la columna derecha, presenta las correcciones. En general, el error ha sido remarcado con negritas.

Esperamos su colaboración en la corrección de errores que se nos hayan pasado por alto, para lo cual agradeceríamos su aporte enviando su opinión o consulta a la casilla de correo del sitio: modeladoeningenieria@frro.utn.edu.ar

Fecha de última actualización: 16/11/2009

Néstor Hugo Rodríguez.

Capítulo III.

Página 93. Ecuación (21)

Dice:

$$\bar{x}_{i+1} = q\ \mathbf{x}_i + (1-q)\ x_{i+1}$$

Debe decir:

$$\bar{x}_{i+1} = q\ \bar{x}_i + (1-q)\ x_{i+1}$$

Página 112

Dice:

$$\sqrt{\frac{1}{f_m}} = -2 + \log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{3.7\,D} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f_m}}\right)$$

Debe decir:

$$\sqrt{\frac{1}{f_m}} = -2 * \log_{10}\left(\frac{\varepsilon}{3.7\,D} + \frac{2.51}{Re\sqrt{f_m}}\right)$$

Capítulo IV.

Página 128. Ecuación (19)

No deben figurar las deltas ya que el vector es X. En el resto de las ecuaciones, la matriz B_1^{-1} debe ir adelante en cada producto matricial.

Página 129. Ecuación (22)

Dentro de los paréntesis debe ir una suma, o lo que es lo mismo, al eliminar los paréntesis, ambos términos son negativos

Página 132

La primera ecuación del ejemplo es incorrecta, con lo que todo el desarrollo hasta el ejemplo siguiente de la página 133, debe eliminarse y reemplazarse por el sistema de ecuaciones siguientes y el desarrollo correcto es:

Ejemplo:

Sea el siguiente sistema:

$$x_1 \ln(x_2) - x_1 + x_1^{(x_2 - x_1)} = 0$$

$$x_1 \ln(3 x_2) + x_2 - 1 = 0$$

con $x_2 \geq 0$, $x_1 \geq 0$. Resolverlo mediante el procedimiento de sustitución directa.

Solución:

Se comienza explicitando el vector $\underline{x} = (x_1, x_2) = \underline{F}(\underline{x})$

$$x_1 = x_1 \ln x_2 + x_1^{(x_2 - x_1)}$$

$$x_2 = 1 - x_1 \ln(3x_2)$$

Sea el vector inicial $\underline{x}^0$ (inicialización) = (0, 2), entonces $\underline{x}^1 = \underline{F}(\underline{x}^0)$.

$$x_1^1 = 0 + 0^2 = 0$$

$$x_2^1 = 1 - 0 = 1$$

Aquí vemos que $\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$, luego el vector (0,1) no es solución del sistema.

$$\underline{x}^2 = \underline{F}(\underline{x}^1)$$

$$x_1^2 = 0 + 0 = 0$$

$$x_2^2 = 1 - 0 = 1$$

Luego $\underline{x}^2 = \underline{x}^1$. Esto implica que $\underline{x} = (0,1)$ es solución del sistema de ecuaciones analizado. Si probamos con otro punto de arranque, (por ejemplo (0.5,0.5)), tenemos:

$$\underline{x}^1 = \underline{F}(\underline{x}^0)$$

$$x_1^1 = 0.5 \ln(0.5) + 0.5 = 0.653426$$

$$x_2^1 = 1 - 0.5 \ln(1.5) = 0.797267$$

$\underline{x}^1 \neq \underline{x}^0$, *luego calculamos* $\underline{x}^2 = F(\underline{x}^1)$

$$x_1^2 = 0.653426$$

$$x_2^2 = 0.797267$$

Luego, calculamos $\underline{x}^3$,

$$x_1^3 = 0.653426 \ln(0.797267) + 0.653426^{(0.797267 - 0.653426)}) = 0.792584$$

$$x_2^3 = 1 - 0.653426 \ln(2.39180) = 0.430181$$

$\underline{x}^3 \neq \underline{x}^2$, *luego*:

$$x_1^4 = 0.792584 \ln(0.430181) = 0.792584^{(0.430181 - 0.792584)} = 0.419310$$

$$x_2^4 = 1 - 0.792584 \ln(1.290543) = 0.79784$$

$$x_1^5 = 0.419310 \ln(0.79784) + 0.41931^{(0.79784 - 0.419310)} = 0.624945$$

$$x_2^5 = 1 - 0.419310 \ln(2.39352) = 0.6340404$$

Siendo las soluciones más aproximadas:

$x_1 = 0.68282645357897$ $x_2 = 0.59936582123074$

Que hacen que las funciones valgan:

$f_1(x_1,x_2) = 9 * 10^{-14}$ $f_1(x_1,x_2) = -1.1 * 10^{-13}$

Página 165.

En la matriz de A^2 el elemento de la fila 3 columna 5 es 1

Página 172. El tercer parágrafo .

Dice

"le introduzca pesos **penalizado** ciertas corrientes"

Debe decir

"le introduzca pesos penalizando ciertas corrientes"

Página 173.

Dice

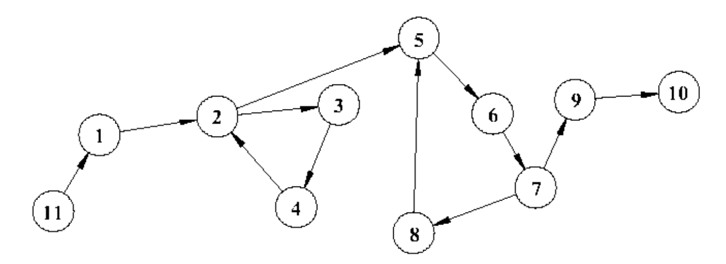


Figura IV.42: Grafo de corrientes asociado al diagrama de flujo de información de la Figura (IV.39).

Debe decir

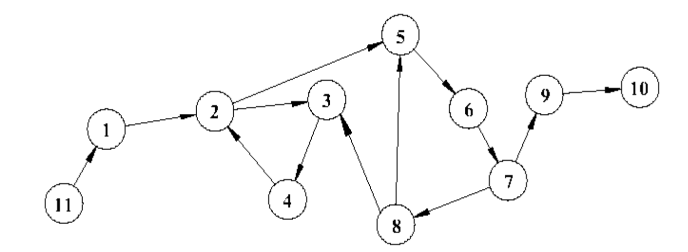


Figura IV.42: Grafo de corrientes asociado al diagrama de flujo de información de la Figura (IV.39).

Página 174.

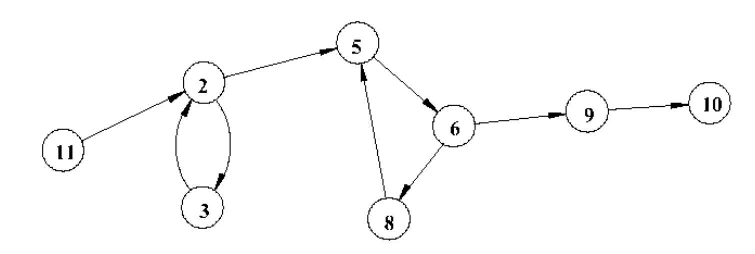


Figura IV.43: Grafo S reducido luego del proceso parcial de fusión.

:

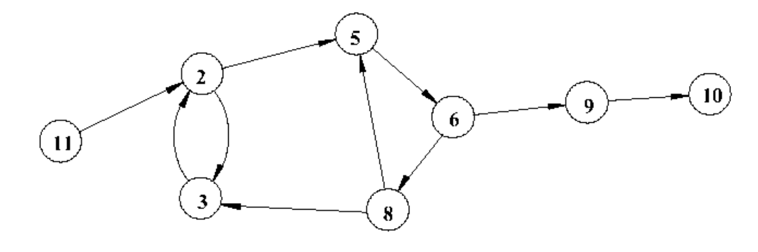


Figura IV.43: Grafo S reducido luego del proceso parcial de fusión.

Página 175.

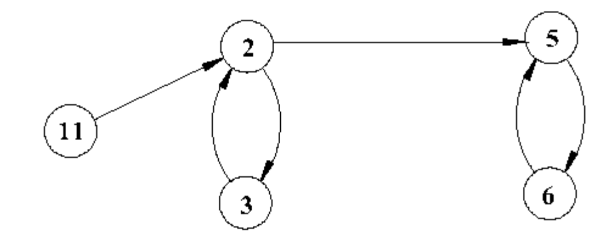


Figura IV.44

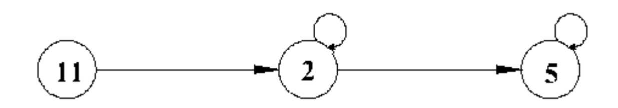


Figura IV.45

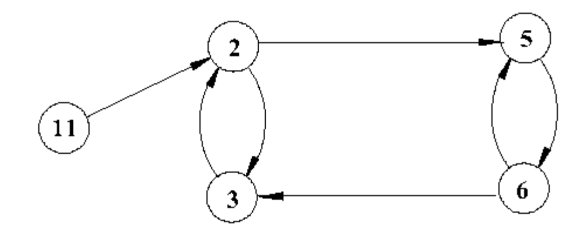


Figura IV.44

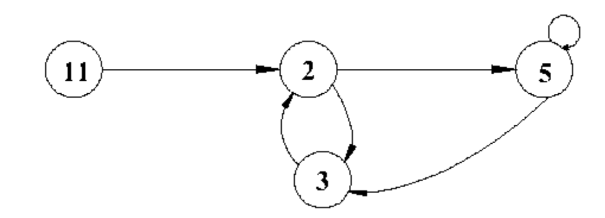


Figura IV.45

Página 176.

Nodo	Antecesores Inmediatos
1	11
2	1,4
3	2
4	3
5	2,8
6	5
7	6
8	7
9	7
10	9

Nodo	Antecesores Inmediatos
1	11
2	1,4
3	2, 8
4	3
5	2,8
6	5
7	6
8	7
9	7
10	9

Página 177.

Nodo	Antecesores
2	11, 2
5	2, 5

Nodo	Antecesores
2	11, 3
5	2, 5
3	2, 5

Nodo	Antecesores
5	5

Nodo	Antecesores
2	2

De lo anterior, se deduce, que el autociclo 2 debe eliminarse , la frase correcta sería:

"Al eliminar 2 (autociclo), nos queda la lista vacía y las dos corrientes de corte; coincidiendo a su vez con los resultados ya obtenidos anteriormente."

Página 179 - Figura IV.48

La corriente 14, ingresa al nodo sumador (26) junto con la corriente 13 y sale la 15.

Página 186

IV.10 PROBLEMAS PROPUESTOS

P1) En la primera ecuación, el logaritmo natural va sumado.

Capítulo V.

Página 194

En el antepenúltimo renglón del primer parágrafo, en " con la longitud y el radio de en un reactor tubular, etc", debería quitarse el "de" con lo que queda: " con la longitud y el radio en un reactor tubular, etc"

Capítulo VII.

Página 251. Ecuación (4)

Falta el signo – detrás de A:

$$\ln Pv = A \frac{B}{T} + C \ln T + \frac{D\, Pv}{T^2}$$

$$\ln Pv = A - \frac{B}{T} + C \ln T + \frac{D\, Pv}{T^2}$$

Página 268.

δ_i es el parámetro de solubilidad de cada sustancia a 25 ºC[(**Cal** /cm^3)$^{0.5}$]

δ_i es el parámetro de solubilidad de cada sustancia a 25 ºC[(gr/cm^3)$^{0.5}$]

Página 279.

Junto a la figura:

moléculas de la clase 1 (**blancas**) están en minoría,

moléculas de la clase 1 (rayadas) están en minoría,

Capítulo VIII.

Página 332.

La ecuación (51) para C=0 dá la ecuación (49).

Capítulo IX.

Página 356. Figura IX.3:

Como el cálculo es adiabático debe borrarse de dicha figura "CALCULAR Q"

Página 359. Caso II. En el punto 3:

Dice	Debería decir
De lo contrario, retornar a **(1)**,	De lo contrario, retornar a (2),

Página 361. Fórmula (22) incorrecta:

Dice:

$$\sum_{1-1}^{NC} [K_i (1-\Phi) + \Phi](K_i + x_i) = 0$$

Debería decir:

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i \Phi (1 - K_i) = 0$$

Página 364. Ecuación (24) Corregir subíndices de las sumatorias y el extremo superior de la segunda sumatoria

$$\sum_{l=1}^{NC} z_i - \sum_{l=1}^{\mathbf{NL}} z_i K_i = 0 \qquad \sum_{i=1}^{NC} z_i - \sum_{i=1}^{NC} z_i K_i = 0$$

Ecuación (25) y (26) Corregir subíndices de la sumatoria.

$$\sum_{l=1}^{NC} z_i K_i = 1 \qquad \sum_{i=1}^{NC} z_i K_i = 1$$

Página 366. Primer ecuación. En el denominar hay una suma en lugar de una resta y el subíndice de la sumatoria es i en lugar de l:

Dice

$$\lim_{\theta \to 1} \left\{ \sum_{l=1}^{NC} \frac{z_i(K_i - 1)}{1 - \theta(K_i - 1)} \right\} = 0$$

Debería decir

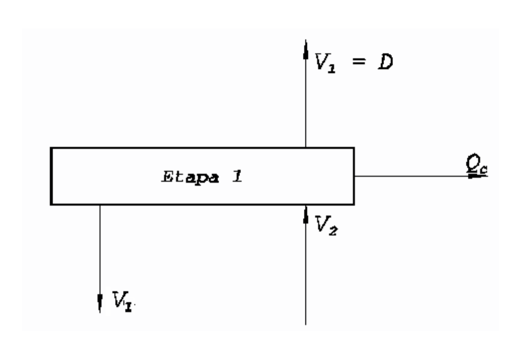
$$\lim_{\theta \to 1} \left\{ \sum_{i=1}^{NC} \frac{z_i(K_i - 1)}{1 + \theta(K_i - 1)} \right\} = 0$$

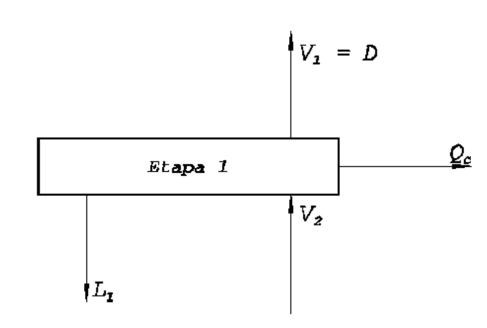
Capítulo X.

Página 394. Fórmula (17)

En el balance de energía por etapas se debe eliminar el subíndice j de V y L en los términos tercero y cuarto del segundo miembro.

Página 415. Figura X.14 Reemplazar V_1 (inferior) por L_1





Página 424.Renglón 10

Dice	Debe decir
general exige **un** buena	general exige una buena

Capítulo XI.

Página 442.

La solución óptima es x_0=18 y no 12. Se demuestra reemplazando en la fórmula a maximizar por los valores de la variable en el punto óptimo $(x_1;x_2)$-(1;4)

Página 447 y 448

Dice	Debe decir
$N\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$	$N\begin{vmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix}$

Página 449. Primer parágrafo. Renglón décimo.

Quitar guión a razo-namiento y a posterio-rmente

Página 456. Ecuación 1

Dice	Debe decir
$-2\ \mathbf{x_2} - \lambda_1\ 2\ x_1 - \lambda_2 = 0$	$-2\ x_1 - \lambda_1\ 2\ x_1 - \lambda_2 = 0$

Página 459. Tabla.

En la primera iteración el valor de λ_k es de 2.5280 en lugar de 2.3280.

Capítulo XII.

Página 508. Renglón 16:

Dice	Debe decir
emdiante modelos analíticos	mediante modelos analíticos

Página 518. Quinto renglón (desde abajo)

Dice	Debe decir
diseño **y y** para las de corte	diseño y, y para las de corte

Página 519. Renglón 1:

Dice	Debe decir
La **VFR** tiene una dimensión	La VFC tiene una dimensión

Capítulo XIII.

Página 541. Tercer parágrafo:

Dice

El *error local de truncamiento* $\boldsymbol{\varepsilon}$

Debe decir

El *error local de truncamiento* e_t

Página 544. Tabla XIII.1

Dice

Método de Euler	
Condición Inicial	
y (t = 0) = 0	
f (t $_i$, y $_i$)	y (t $_i$)
3.0000	0 .0000

Debe decir

Método de Euler	
Condición Inicial	
y (t = 0) = 1	
f (t $_i$, y $_i$)	y (t $_i$)
3.0000	1.0000

Página 554. Ecuaciones (50), tercera fórmula:

Dice

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \mathbf{h}\, k_1\right)$$

Debe decir

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} k_1\right)$$

Página 556. Ecuaciones (51), cuarta fórmula:

$$k_3 = f\left(t_i + 1/2\, h, y_i + \left(-1/2 + 1/\sqrt{2}\right) h\, k_1 \mathbf{, y_i} + \left(1 - 1/\sqrt{2}\right) h\, k_2\right)$$

$$k_3 = f\left(t_i + 1/2\, h, y_i + \left(-1/2 + 1/\sqrt{2}\right) h\, k_1 + \left(1 - 1/\sqrt{2}\right) h\, k_2\right)$$

Ecuaciones (52), quinta fórmula:

$$\mathbf{k} = f(\mathbf{t} + h\,, \mathbf{y} + h\,\mathbf{k} - h\,\mathbf{k} + h\,\mathbf{k})$$

$$k_4 = f(t_i + h\,, y_i + h\,k_1 - h\,k_2 + h\,k_3)$$

Capítulo XIV.

Página 582. Ecuación (25):

$$k = k_0 \exp(- R\,\mathbf{T} / \Delta H_r)$$

$$k = k_0 \exp(- \Delta H_r / R\,T_L)$$

Página 590. En la figura,

Dice	Debe decir
Figura XIV.11: Evolución de las alturas luego del escalón en Cv3.	Figura XIV.11: Evolución de las alturas luego del escalón en la presión, P_e.

Página 597. Ecuación 68.

Dice	Debe decir
$V_v = K\,(P_{\mathbf{v}} - P_{\mathbf{vs}})$	$V_v = K\,(P_{vs} - P_v)$

Página 600. Problema 7, tercera línea:

Dice	Debe decir
rebosadero (que puede asumirla constante	rebosadero (que **no** puede asumirla constante

Capítulo XV.

Página 611. Ecuación (1):

$$\frac{dM_{ij}}{dt} = F\,\mathbf{z_i} + V_{i+1}\,y_{i+1,j} + L_{i-1}\,x_{i-1,j} - V_i\,y_{i,j} - L_i\,x_{i,j} + RE_{i,j}$$

$$\frac{dM_{ij}}{dt} = F\,z_{i,j} + V_{i+1}\,y_{i+1,j} + L_{i-1}\,x_{i-1,j} - V_i\,y_{i,j} - L_i\,x_{i,j} + RE_{i,j}$$

Página 615. Ecuación (18):

$$RE_{i,j} = \sum_{k=1}^{m} r_{i,k}\; v_{j,k}$$

$$RE_{i,j} = \left(\sum_{k=1}^{m} r_{i,k}\; v_{j,k}\right) V\,\rho_i$$

Capítulo XVI.

Página 660. Renglón 6:

Dice	Debe decir
de la reacción en **10C**; y iii)	de la reacción en 10ºC; y iii)

Capítulo XIX.

Página 741. Penúltimo renglón:

de las **distintos** estrategias desde	de las distintas estrategias desde

Página 751. Figura inferior:

Fig.5*a*: Operación con almacenamiento intermedio	**Fig.5b:** Operación con almacenamiento intermedio

Capítulo XX.

Página 786. Ecuación (19)
Le falta el paréntesis que cierra:

Dice	Debe decir
(19	(19)